

Einfluss von Unsicherheiten in Materialparametern auf Finite-Elemente Simulationen

D i s s e r t a t i o n

zur Erlangung des Doktorgrades
der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)

vorgelegt von

Dipl.-Phys. Stephan Krämer
aus Erfurt

genehmigt von der Fakultät für
Mathematik/Informatik und Maschinenbau,
der Technischen Universität Clausthal,

Tag der mündlichen Prüfung
25.09.2015

Vorsitzender der Prüfungskommission
Prof. Dr.-Ing. habil. Alfons Esderts

Hauptberichterstatter
Prof. Dr.-Ing. habil. Stefan Hartmann

Berichterstatter
Prof. Dr.-Ing. Stefan Diebels
Universität des Saarlandes

Danksagung

Diese Arbeit entstand in den Jahren 2009 bis 2015 in meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für technische Mechanik an der Technischen Universität Clausthal. In dieser Zeit wurde mir insbesondere von meinem Doktorvater Herrn Prof. Dr.-Ing. Stefan Hartmann die Möglichkeit geschaffen, mich fachlich und menschlich stark weiterzuentwickeln.

Daher gilt mein ganz besonderer Dank ihm, der mir in vielen Stunden mit bewundernswerter Sachlichkeit und Pragmatik sowie unzähligen Hinweisen, Anmerkungen und Korrekturen stets hilfreich und motivierend zur Seite stand. Seine Betreuung und die wichtigen Denkanstöße waren stets hilfreich für mich, insbesondere seine auf Präzision bedachte Art und Weise leitet mich bis heute.

Aufgrund seiner, keineswegs selbstverständlichen und kurzfristigen Bereiterklärung zur Übernahme des Koreferats möchte ich mich auch herzlich bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Stefan Diebels von der Universität des Saarlandes in Saarbrücken danken. Zudem gilt mein Dank den Herren Prof. Dr.-Ing. Alfons Esderds und Prof. Dr.-Ing. Gunther Brenner sowie Frau Prof. Dr.-Ing. Stefanie Retka für ihr Mitwirken im Prüfungskomitee.

Weiterhin muss ich häufig an meinen langjährigen Kollegen Herrn Dr. Torben Netz denken. Die vielen hilfreichen fachlichen und nichtfachlichen Diskussionen haben sich stets als nützlich erwiesen. Für seine Hilfe bei numerischen Problemen und Fragestellungen und seine kollegiale Unterstützung möchte ich mich an dieser Stelle bei Herrn Dr. Steffen Rothe bedanken. Einen weiteren großen Anteil am Gelingen dieser hat Herr Dipl.-Ing. Matthias Grafenhorst, dem ich für seine Unterstützung in kritischen Momenten besonders verbunden bin. Seine Hilfsbereitschaft und Zuverlässigkeit haben besonders in den letzten Tagen des Entstehungsprozesses sehr zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Für die nicht nur fachlich interessanten Gespräche vor allem zu Beginn meiner Tätigkeit am Institut für technische Mechanik, gilt mein Dank meinem Kollegen Herrn Dr. Ahmad-Wahadj Hamkar. Ebenso habe ich Herrn Dr. Raad Al-Kinani sehr zu schätzen gelernt. An seine offene und herzliche Art werde ich mich stets gern erinnern.

Für ihre ganz besondere Unterstützung in jeder nur denkbaren Weise bin ich auch Frau Dipl.-Ing. Maria Angeles Martinez Page zu großem Dank verpflichtet.

Es ist an dieser Stelle leider unmöglich, alle Personen namentlich zu nennen, die Einfluss auf diese Arbeit gehabt haben. Zu guter Letzt möchte ich mich daher bedanken bei Frau Dr.-Ing. Carmen Sguazzo, Herrn M. Sc. Rose Rogin Gilbert, Dipl.-Ing. Chris

Leistner, Dr. Roger Aragall, Heidi Andresen-Tanumihardja und vielen Weiteren. Ganz allgemein bin ich äußerst dankbar für die sehr angenehme und kollegiale Atmosphäre innerhalb des gesamten Instituts für technische Mechanik, die nur durch ein positives Zusammenwirken aller Personen möglich war. Die gesamte Zeit wird mir für immer in guter Erinnerung bleiben.

Vielen Dank!

Stephan Krämer

Abstract

One fundamental part of engineering mechanics is the simulation of physical bodies on which critical decisions for the manufacturing process are based on. The main goal is to produce light and robust components in e.g. the automotive and aircraft industry, which are easy to manufacture in an efficient low cost production process. At the same time, the produced parts should always fulfill highest safety, stability and durability requirements. The necessary complex simulations are, however, subject to errors, which arise from widespread areas. First of all, the physical body needs to be described geometrically in the form of discretized meshes, which itself introduces approximations and with it uncertainties. Furthermore the body has to be described by a mathematical model, which characterizes the physical behaviour.

In the context of the established finite element method these models view the underlying material only in respect to its behaviour based on several observations of the materials habits, not claiming a completely correct description of the material. These constitutive models are calibrated by the means of material parameters which need to be measured, and thus inhabit additional uncertainties. The solution to such constitutive models is also prone to errors, because the direct analytical solution of these complex mathematical models is typically impossible to obtain. Only approximate solutions in the time domain can be computed, which in combination with the listed uncertainties lead to reasonable but error-prone solutions. Although concepts for quantifying uncertainties were developed half a century ago and are quite common in other areas such as physics or mathematics, engineering mechanics typically operate by means of safety factors and boundaries instead of incorporating such quantitative uncertainty measures into the standard simulation approaches.

The finite element method has proven to be a reliable tool for simulating problems of industrial scale and interest. In this work the well established sensitivity analysis is applied to finite element simulations in order to get a quantitative view on the errors resulting from uncertainties of material parameters. For this purpose the underlying structure of equations relevant to these simulations is analyzed in order to find possibilities of incorporating the uncertainty analysis into the finite element simulations in a way, which is numerically robust.

Using the example of the constitutive models of hyperelasticity and viscoplasticity the overall procedure is investigated. From experimental results, which are used to derive the parameters of the model, to the simulation of three dimensional structures, it is explored, how all parts of this process are subject to uncertainties and how this influences the final outcome. With the application of these concepts together with other sources of uncertainties, one will be able to investigate critical stresses and assess the certainty of these numerical predictions.

Inhaltsverzeichnis

Inhalt	iii
1 Einführung	1
2 Kontinuumsmechanische Grundlagen	7
2.1 Kinematik	8
2.1.1 Konfigurationen und Bewegungen	8
2.1.2 Deformationsgradient	9
2.1.3 Polare Zerlegung des Deformationsgradienten	10
2.1.4 Zerlegung des Deformationsgradienten	12
2.2 Mechanische Spannungen	13
2.3 Bilanzgleichungen der Mechanik	15
2.3.1 Massenbilanz	15
2.3.2 Impulsbilanz	16
2.3.3 Drehimpulsbilanz	16
2.3.4 Energiebilanz - erster Hauptsatz der Thermodynamik	17
2.3.5 Entropiebilanz - zweiter Hauptsatz der Thermodynamik	17
2.4 Materialmodelle	18
3 Finite Elemente	21
3.1 Das Anfangsrandwertproblem	21
3.2 Raumdiskretisierung	24
3.2.1 Vertikale Linienmethode	24
3.2.2 Räumliche Diskretisierung	24
3.3 Zeitintegration	31
3.4 Mehrebenen-Newton Verfahren (MLNA)	34
4 Statistische Grundlagen	37
4.1 Grundlagen der Wahrscheinlichkeitsrechnung	38
4.1.1 Zufall und Wahrscheinlichkeit	38
4.1.2 Zusammenhang zwischen empirischer Statistik und Stochastik	39
4.2 Stichprobe	40
4.3 Lage- und Streuungsmaße zur Charakterisierung von Stichproben	41
4.3.1 Mittelwert - arithmetisches Mittel	41
4.3.2 Varianz und Standardabweichung	42

4.3.3	Kovarianz	44
4.3.4	Korrelation	45
4.4	Häufigkeitsverteilung	47
4.4.1	Absolute und relative Häufigkeit	47
4.4.2	Histogramme	48
4.4.3	Empirische Verteilungsfunktion	50
4.4.4	Wahrscheinlichkeitsdichte	51
4.4.5	Normalverteilung	51
4.5	Wahrscheinlichkeitsverteilungen	52
4.5.1	Normalverteilung	52
4.5.2	t-Verteilung	52
4.5.3	Zentraler Grenzwertsatz	54
4.6	Vertrauen in statistische Aussagen	54
4.6.1	Konfidenzintervall	55
4.6.2	Signifikanz der Korrelation	56
4.7	Unsicherheiten und Messfehler	57
4.7.1	Lineare Fehlerfortpflanzung	58
4.7.2	Gaußsche Fehlerfortpflanzung	59
4.7.3	Fehlerfortpflanzung höherer Ordnung	60
5	Sensitivitätsanalyse	63
5.1	Einführung	63
5.2	Problemstellung	64
5.3	Sensitivitätsanalyse im Sinne der Finite-Elemente Methode	67
5.4	Berechnung der Unsicherheiten	70
5.4.1	Beschaffung der notwendigen Ableitungen	70
5.4.2	Berechnung der Unsicherheiten in den Verschiebungen	74
5.4.3	Berechnung der Unsicherheiten in den Spannungen	75
5.4.4	Beispiel: Lineare Elastizität	76
5.4.5	Verschiebungsgesteuerte Prozesse	77
5.5	Anmerkung zum zusätzlichen Aufwand	81
6	Parameteridentifikation	83
6.1	Optimierung	83
6.1.1	Optimierungsverfahren	85
6.1.2	Allgemeine Strategien zur Vorgehensweise	87
6.2	Least-Squares Verfahren	88
6.2.1	Lineare Least-Squares Verfahren	90
6.2.2	Nichtlineare Least-Square Verfahren	90
6.2.3	Probleme bei der Anwendung - Konditionierung	91
6.2.4	Qualität der Optimierung	92
6.2.5	Determinationskoeffizient	93

6.3	Reduktion von Materialmodellen	93
6.3.1	Grundlegende Gedanken	94
6.3.2	Algebraischer Zwang	94
6.3.3	Allgemeine Formulierung	96
6.3.4	Anwendung des Mehrebenen-Newton Verfahrens	98
7	Beispiele	105
7.1	Hyperelastizität bei Inkompressibilität	105
7.1.1	Einaxialer Zug	107
7.1.2	Sensitivität	109
7.2	Sensitivität der Hyperelastizität	110
7.2.1	Erzeugung von gestreuten Messdaten	111
7.2.2	Parameteridentifikation	112
7.2.3	Sensitivitätsanalyse	118
7.2.4	Einflussuntersuchung	120
7.3	Lineare Viskoelastizität	130
7.3.1	1D-Formulierung	130
7.3.2	Einaxialer Zug - analytische Lösung (1D)	132
7.3.3	3D-Formulierung	133
7.3.4	Einaxialer Zug - analytische Lösung (3D)	134
7.3.5	Sensitivität	138
7.3.6	Vergleich der reduzierten Lösungen	139
7.4	Sensitivitätsanalyse der Viskoelastizität	140
7.4.1	Identifikation mit Hilfe der analytischen Lösung	141
7.4.2	Identifikation mit Hilfe numerischer Methoden	143
7.5	Viskoplastizität	146
7.5.1	Materialmodell	146
7.5.2	Experimentelle Daten	148
7.5.3	Parameteridentifikation	149
7.5.4	Dickwandiges Rohr unter Innendruck	153
7.5.5	Konkrete Problemstellung	154
7.5.6	Sensitivitätsanalyse	155
8	Zusammenfassung	159
	Anhang	161
1	Studentsche t-Verteilung	161
2	Anwendung des impliziten Euler Verfahrens zur Bestimmung des Ableitungen	162
3	Berechnung der Diagonalelemente des Matrixprodukts \mathbf{ABA}^T	162
4	Filtermatrizen	163

1 Einführung

Die Ingenieurwissenschaften sind der nächste Schritt bei der Umsetzung und Anwendung von den in den Naturwissenschaften gewonnenen Erkenntnissen. Während Naturwissenschaften den Grundstein jeder Forschung legen, sind die Ingenieurwissenschaften ebenso bedeutsam, da sie anwendungsorientiert die gewonnenen Ergebnisse nutzen und diese mit Fokus auf Verfahren, Methoden und anwendbare Geräte weiterentwickeln. Ein wesentlicher Bestandteil ist die Entwicklung, Konstruktion und Produktion von Bauteilen, welche stets konkrete praktische Aufgaben und Rahmenbedingungen erfüllen müssen. Um ihrer Aufgabe gerecht zu werden, müssen diese Bauteile bestimmten Anforderungen genügen, z.B. müssen sie gewisse Belastungen aushalten und umleiten. Um sicherzustellen, dass bestimmte Grenzwerte nie¹ überschritten werden, sind umfangreiche Berechnungen notwendig, die wiederum mithilfe theoretischer Erkenntnisse durchgeführt werden. Da die zugrundeliegende physikalische Realität sehr komplex ist, wird sie mit Hilfe von Modellen beschrieben, welche die wichtigsten physikalischen Eigenschaften wiedergeben. Diese Simulationen der physikalischen Gegebenheiten werden mit Hilfe von immer leistungsfähigeren Computern durchgeführt. Aufgrund der sich rasant entwickelnden Rechentechnik der letzten Jahrzehnte ist die computergestützte Simulation heutzutage fester Bestandteil eines jeden Konstruktionsprozesses geworden. Mit ihrer Hilfe ist es möglich lange vor den Produktionsprozessen Aussagen über die Belastbarkeit und Eigenschaften der entworfenen Bauteile zu machen. Zudem erlauben sie, teure und zeitaufwendige Experimente einzusparen und die Form und die Art des Einsatzes schon im Vorfeld zu optimieren.

Ein verbreitetes und bewährtes Hilfsmittel zur Durchführung dieser Simulationen stellt die Finite-Elemente Methode dar. Sie stellt eine Möglichkeit zur numerischen Berechnung der genannten Problemstellung bereit. Diese setzt neben adäquaten numerischen Methoden und einem geometrischen Modell des Körpers auch ein Modell für den zu berechnenden Körper voraus, welches das Verhalten des Werkstoffs in der konkret betrachteten Anwendung möglichst präzise beschreibt. Solche Materialmodelle sind häufig im Sinne der Kontinuumsmechanik motiviert, welche eine einheitliche Beschreibung von Prozessen und Eigenschaften erlaubt, ohne die genaue Mikrostruktur des jeweiligen Materials zu untersuchen. Es stellt lediglich eine mathematische Beschreibung des beobachteten Materialverhaltens dar. Bei Anwendung in der Methode der Finiten Elemente liefert dieses eine Näherungslösung des Problems, die einen sinnvollen Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenzeit ermöglicht.

¹D.h. während eines normalen, vorgesehenen Gebrauchs.

Neben der Simulation von Bauteilen hat sich im letzten Drittel des vorhergehenden Jahrhunderts die sogenannte Sensitivitätsanalyse entwickelt. Sie hat zum Ziel, herauszufinden, wie empfindlich sich ein Modell bezüglich seiner bestimmenden Parameter verhält. Mit dieser Kenntnis ist es möglich, schon bei der Erstellung von Modellen eine gezielte Optimierung hinsichtlich z.B. der Parameter oder der Geometrie durchzuführen. Damit eng verknüpft ist die Fehleranalyse, welche dazu dient, die naturgegebenen Unsicherheiten mit in das Modell einzubeziehen. In Form einer Fehlerfortpflanzung ist diese Methode in Disziplinen wie der Physik oder der Mathematik sehr verbreitet. Die Ingenieurwissenschaften machen davon bisher keinen standardmäßigen Gebrauch, sie arbeiten zumeist mit Sicherheitsfaktoren, anstatt die quantitative Erfassung von Unsicherheiten in die Modelle selbst mit einzubeziehen.

Die hier vorliegende Arbeit soll als Motivation dienen, dies zu ändern. Es wird mit Hilfe der Sensitivitätsanalyse gezeigt, wie sich die Unsicherheiten in den bestimmenden Parametern konstitutiver Modelle über die Simulation mit finiten Elementen fortpflanzen. Dabei wird auch auf die Frage eingegangen, woher die Informationen über die Unsicherheiten stammen und wie man schließlich die erhaltenen Ergebnisse interpretieren kann.

Finite-Elemente Simulationen

Aus der Sicht der Kontinuumsmechanik können alle Materialien durch mathematische Modelle beschrieben werden, die von ihrem Aufbau her sehr unterschiedlich sein können. Haupt (2002) unterteilt die grundlegende Reaktionsweise von Materialien in die vier Klassen Elastizität, Plastizität, Viskoelastizität und Viskoplastizität. Geschichtsabhängiges Materialverhalten wird häufig durch Materialmodelle vom Evolutionsgleichungstyp beschrieben. Dabei werden die Materialeigenschaften neben einer Elastizitätsbeziehung durch innere Variablen beschrieben, welche durch gewöhnliche Differentialgleichungen charakterisiert sind.

Die Finite-Elemente Methode (FEM) nutzt zur Lösung der zugrundeliegenden partiellen Differentialgleichungssysteme die vertikale Linienmethode (siehe z.B. (Fritzen, 1997; Wittekindt, 1991) oder (Schiesser, 1991)). Dabei wird zuerst eine räumliche Diskretisierung des betrachteten Problems durchgeführt und die schwache Form der Impulsbilanz ausgewertet. Dies führt bei quasistatischen Problemstellungen auf ein nichtlineares Gleichungssystem, welches zusammen mit den Evolutionsgleichungen gelöst werden muss. Formal handelt es sich dabei um ein Algebro-Differentialgleichungssystem (DAE-System), welches zur Lösung in der FEM mit Hilfe des Mehrebenen-Newton Verfahrens gelöst wird, siehe z.B. (Büttner und Simeon, 2003), (Hartmann, 1998) und (Rabbat et al., 1979). Daher ist es möglich, Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung z.B. in der Form von diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren anzuwenden ((Hairer und Wanner, 1996), (Ellsiepen und Hartmann, 2001)). Eine schrittweitengesteuerte Anwendung dieser Verfahren auf ein thermo-viskoplastisches Materialmodell wird u.a. in

Quint (2012) angewendet. Auch andere Verfahren wie halbexplizite Runge-Kutta Verfahren oder zeitadaptive Rosenbrock Verfahren sind anwendbar, siehe dazu (Rothe et al., 2012) bzw. (Hartmann und Hamkar, 2010).

Optimierung

Jedes konstitutive Modell ist durch Parameter definiert, die abseits der zugrundeliegenden Gleichungsstruktur das Werkstoffverhalten des zu beschreibenden Materials charakterisieren. Um diese Parameter zu bestimmen, müssen die Parameter so gewählt werden, dass vorhandene experimentelle Messdaten möglichst genau wiedergegeben werden. Es handelt sich um eine sogenannte Least-Square Problemstellung (Methode der kleinsten Quadrate), welches im Endeffekt die Lösung eines überbestimmten Gleichungssystems darstellt. Dieses klassische Optimierungsproblem wird dabei als Minimierungsproblem formuliert.

Dieses Feld ist in der Mathematik wohlbekannt und wird in Standardwerken wie (Gill et al., 1981), (Nocedal und Wright, 1999) oder (Tarantola, 2005) ausgiebig behandelt. Aufgrund der Struktur der zugrundeliegenden Modelle handelt es sich im Zuge der FEM meist um Probleme der nichtlinearen Optimierung.

Eines der grundlegenden Merkmale dieser Optimierung ist die Tatsache, dass meist (selbst bei linearer Elastizität) mehrere Lösungen (d.h. Minima) existieren. Da es sich bei den zu minimierenden Funktionen in den meisten Fällen um mehrdimensionale Probleme handelt, ist ein Auffinden eines solchen Minimums nicht ohne weiteres möglich. Man möchte von der Wirkung (d.h. den Messdaten) auf die Ursache (die Parameter) schließen, es handelt sich um ein sogenanntes inverses Problem (siehe z.B. (Tarantola, 2005) und (Mahnken, 1998), (Mahnken und Stein, 1996b)). Zur Lösung des inversen Problems werden Optimierungsalgorithmen angewendet, welche verschiedene Strategien verfolgen (gradientenbasierte Verfahren (Coleman und Li, 1996), genetische Algorithmen (Goldberg, 1989), Monte-Carlo Verfahren (Joint Committee for Guides in Metrology (JCGM), 2008)). Deren Anwendung im Bereich der Finiten-Elemente Simulationen wird u.a. in (Mahnken und Stein, 1996a), (Hartmann et al., 2006), (Chen und Diebels, 2014) sowie (Kretschmar, 1998) diskutiert.

Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse

Die Anwendung der Sensitivitätsanalyse hat sich anfänglich in der Regelungstechnik etabliert (siehe (Adelman und Haftka, 1986) und (Radanović, 2014) und z.B. (Brayton und Spence, 1980)). Sie beschäftigt sich mit der Fragestellung, wie und wie stark sich das Ergebnis eines mathematischen Modells verändert, wenn die Eingabeparameter oder die zugehörigen Rand- und Anfangsbedingungen verändert werden. Sie ist eng verknüpft mit der Optimierung, da in beiden Fällen die Ableitungen hinsichtlich der zu

untersuchenden Parameter gebildet werden. Anwendung findet dies u.a. in den Arbeiten (Mahnken, 1999), (Mahnken, 2000) oder (Mahnken und Stein, 1997).

Die damit bereitgestellten Ableitungen können genutzt werden, um z.B. eine Strukturoptimierung durchzuführen ((Haug, 1976), (Haug und Rousselet, 1980)). Sie können auch genutzt werden, um Unsicherheiten in Systemen zu charakterisieren, siehe u.a. (Saltelli, 2004).

In Hinblick auf die FEM wird die Analyse von Unsicherheiten bisher eher aus dem wahrscheinlichkeitstheoretischen Umfeld betrachtet (siehe dazu u.a. (Matthies et al., 2012), (Rosić, 2013), (Rosić et al., 2013), (Rosić und Matthies, 2008) und (Spanos und Zeldin, 1998)).

Zielsetzung

In dieser Arbeit wird nur zum Teil auf den wahrscheinlichkeitstheoretischen Hintergrund eingegangen. Vielmehr soll eine möglichst zügige und leicht zugängliche Methodik motiviert werden, die es ermöglicht, mit den schon zur Verfügung stehenden Konzepten die Unsicherheiten von Simulationen quantitativ zu erfassen. Es soll dabei gezeigt werden, wie Unsicherheiten in den Materialparametern abgeschätzt werden können und wie diese sich fortpflanzen bis hin zur abschließenden Simulation von realen Bauteilen.

Gliederung der Arbeit

Im ersten Teil der Arbeit werden die notwendigen Grundlagen kurz angerissen. Es wird davon ausgegangen, dass der Leser mit den Grundlagen der Kontinuumsmechanik und im Bereich der Finite-Elemente-Simulationen größtenteils vertraut ist. Die kurze Einführung in Kapitel 2 und Kapitel 3 dient daher vor allem der Einführung der verwendeten Notation.

Kapitel 2 geht dabei auf die Kinematik deformierbarer Körper ein und nennt ohne eine vollständige Herleitung die Bilanzgleichungen der Mechanik.

Kapitel 3 zeigt ausgehend von der lokalen Form des Anfangsrandwertproblems den Übergang zur Methode der finiten Elemente. Dabei wird zuerst eine räumliche Diskretisierung im Sinne von Elementen mit linearen Ansatzfunktionen (h-FEM) vorgenommen. Die anschließende Zeitdiskretisierung erfolgt mit Hilfe von diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren.

Eine Einführung in die Begriffe der Statistik wird in Kapitel 4 gegeben. Dabei wird auf Wahrscheinlichkeitsverteilungen eingegangen, bevor Maße zur Beschreibung von Unsicherheiten definiert werden.

Nach einer kurzen Einführung in die Sensitivitätsanalyse in Kapitel 5, wird die Anwendung hinsichtlich der FEM diskutiert und aufgezeigt, wie die Bestimmung der zur Sensitivitätsanalyse notwendigen Gleichungen auf Elementebene der FEM ausgeführt

werden. Dabei wird klar, welche Anteile schon bekannt sind und innerhalb der Anwendung des Mehrebenen-Newton Verfahrens berechnet werden.

Im Kapitel 6 werden die Konzepte zur Optimierung von Materialparametern in der FEM angerissen und der Zusammenhang zur Statistik sowie den Unsicherheiten gezeigt.

In den Beispielen von Kapitel 7 werden die vorher angesprochenen Konzepte angewendet. Im Abschnitt 7.2 wird ein (in Abschnitt 6.3 vorgestelltes) Konzept ausgenutzt und eine Re-Identifikation der Materialparameter eines hyperelastischen Materialmodells durchgeführt. Die daraus erhaltenen Unsicherheiten werden in Form einer Unsicherheitsanalyse auf ein konkretes Bauteil angewendet und die erhaltenen Ergebnisse interpretiert und analysiert.

In Abschnitt 7.3 wird anschließend für das Materialmodell der linearen Viskoelastizität gezeigt, warum zur korrekten Optimierung ein Materialmodell in seiner dreidimensionalen Form angewendet werden sollte. Schon in diesem gezeigten Fall ergeben sich signifikante Unterschiede zur Nutzung einer eindimensional motivierten Formulierung.

Im letzten Abschnitt der Beispiele wird ein Materialmodell der Viskoplastizität verwendet. Experimentelle Daten werden genutzt, um eine Materialparameteridentifikation durchzuführen und hier ebenfalls die so erhaltenen Unsicherheiten der Parameter in das axialsymmetrische Modell eines dickwandigen Rohres unter Innendruck eingebettet und die erhaltenen Ergebnisse interpretiert.

Im Kapitel 8 werden schließlich die Erkenntnisse und Ergebnisse zusammengefasst.

2 Kontinuumsmechanische Grundlagen

Das Verhalten realer Körper unter dem Einfluss von äußeren Kräften ist von großem Interesse in weiten Teilen der industriellen Konstruktion. Die dafür zur Verfügung stehende Methodik der Kontinuumsmechanik wurde seit ihren Anfängen im letzten Jahrhundert stetig weiterentwickelt und stellt das Fundament für Berechnungen mechanischer Belastungen dar. Im folgenden Kapitel soll ein kurzer Überblick geschaffen werden, um alle Konzepte und Vorgehensweisen anzureißen, die in dieser Arbeit benötigt werden. Einen umfassenden Überblick über die Kontinuumsmechanik geben zum Beispiel die Bücher von Haupt (2002), Altenbach und Altenbach (1994), Truesdell und Noll (2004) sowie Holzapfel (2000).

Die Annahme eines Kontinuums ignoriert die Gegenwart von kleinen Partikeln, seien diese nun einzelne Atome oder Körner in der Struktur eines Körpers. Das Kontinuum beschreibt eine Punktmenge, die zu jedem Zeitpunkt t einen Teil des euklidischen Raumes stetig ausfüllt, wobei sich in der infinitesimalen Umgebung jedes materiellen Punktes \mathcal{P} unendlich viele weitere Punkte des Kontinuums befinden. Der Punkt \mathcal{P} wird durch seinen Ortsvektor \vec{X} vollständig definiert und beschreibt lediglich den Ort im Raum, d.h. er enthält keine weiteren Informationen über Eigenschaften wie Masse oder elektrische Ladung und ist daher nicht zu verwechseln mit physikalischen Teilchen wie z.B. Atomen oder Molekülen. Diese vereinfachende Darstellung der Realität ist gerechtfertigt, solange die zu untersuchenden Bauteile deutlich größer als die zugrundeliegenden Partikel sind.

Mit diesem Konzept lässt sich die Feldtheorie der Kontinuumsmechanik entwickeln. Ihr Hauptbestandteil sind skalarwertige, vektor- oder tensorwertige Feldgrößen, welche vom Ort \vec{X} und der Zeit t abhängen. Im Bereich der Festkörpermechanik wird die Kontinuumsmechanik angewandt, um die Deformation und Bewegung von Körpern zu untersuchen sowie die in einem Körper vorhandenen Spannungen zu bestimmen. Mit Hilfe grundlegender mechanischer Bilanz- und Materialgleichungen lassen sich die Zusammenhänge modellieren.¹

¹In der Fluidmechanik liegt der Fokus eher auf dem Druck und der Geschwindigkeit des Kontinuums, während in der Festkörpermechanik die Bewegung und Deformation im Vordergrund steht. Beides sind äquivalente Teilgebiete der Kontinuumsmechanik. In dieser Arbeit soll allerdings nur der Teil der Festkörpermechanik eine Rolle spielen.

2.1 Kinematik

2.1.1 Konfigurationen und Bewegungen

Jeder materielle Punkt \mathcal{P} als Bestandteil des materiellen Körpers \mathcal{B} (d.h. $\mathcal{B} = \{\mathcal{P}\}$) ist eine eindeutige Abbildung $\vec{\chi}$ der Art

$$\vec{\chi} : \begin{cases} \mathcal{B} & \rightarrow \vec{\chi}[\mathcal{B}] \subset \mathbb{R}^3 \\ \mathcal{P} & \mapsto \vec{\chi}(\mathcal{P}) = (x_1, x_2, x_3) \Leftrightarrow \mathcal{P} = \vec{\chi}^{-1}(x_1, x_2, x_3) \end{cases}, \quad (2.1)$$

welche den materiellen Punkt \mathcal{P} eindeutig durch ein Zahlentripel charakterisiert. $\vec{\chi}$ wird dabei als Konfiguration bezeichnet. Es sind mehrere solcher Konfigurationen denkbar, diese erfüllen die Voraussetzung der stetigen Differenzierbarkeit und Eindeutigkeit². Zusammen mit einem Basissystem $(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$ kann der Ortsvektor $\vec{x} = x_i \vec{e}_i$ definiert werden,

$$\vec{x} = \vec{\chi}(\mathcal{P}). \quad (2.2)$$

Die Bewegung eines materiellen Punktes kann durch eine kontinuierliche Folge von Momentankonfigurationen $\vec{\chi}_t$ in Abhängigkeit der Zeit t beschrieben werden. Für diese gilt

$$t \mapsto \vec{\chi}_t : \begin{cases} \mathcal{B} & \rightarrow \vec{\chi}_t[\mathcal{B}] \subset \mathbb{R}^3 \\ \mathcal{P} & \mapsto \vec{\chi}_t(\mathcal{P}) = (x_1(t), x_2(t), x_3(t)) \Leftrightarrow \mathcal{P} = \vec{\chi}_t^{-1}(x_1(t), x_2(t), x_3(t)). \end{cases} \quad (2.3)$$

Darüber hinaus definiert man eine Referenzkonfiguration

$$\vec{\mathcal{R}} : \begin{cases} \mathcal{B} & \rightarrow \vec{\mathcal{R}}[\mathcal{B}] \subset \mathbb{R}^3 \\ \mathcal{P} & \mapsto \vec{\mathcal{R}}(\mathcal{P}) = (X_1, X_2, X_3) \Leftrightarrow \mathcal{P} = \vec{\mathcal{R}}^{-1}(X_1, X_2, X_3) \end{cases} \quad (2.4)$$

innerhalb derer jeder Punkt eindeutig durch das Zahlentripel (X_1, X_2, X_3) bestimmt ist. Damit gilt für den zeitabhängigen Ortsvektor

$$\vec{x}(t) = \vec{\chi}_t(\mathcal{P}) \Leftrightarrow \vec{\mathcal{R}} = \vec{\chi}_t^{-1}(\mathcal{P}). \quad (2.5)$$

Da die Referenzkonfiguration keine Zeitabhängigkeit aufweist, kann man die Bewegung eines materiellen Punktes darstellen als

$$\vec{x}(t) = \vec{\chi}_t(\vec{\mathcal{R}}^{-1}(\vec{X})) = \vec{\chi}_R(\vec{X}, t). \quad (2.6)$$

Die angesprochenen Konfigurationen sind in Abbildung 2.1 dargestellt. Es wird davon

²D.h. benachbarte materielle Punkte bleiben stets benachbart und jeder Punkt \mathcal{P} kann sich nur an einem Punkt einer Konfiguration befinden.

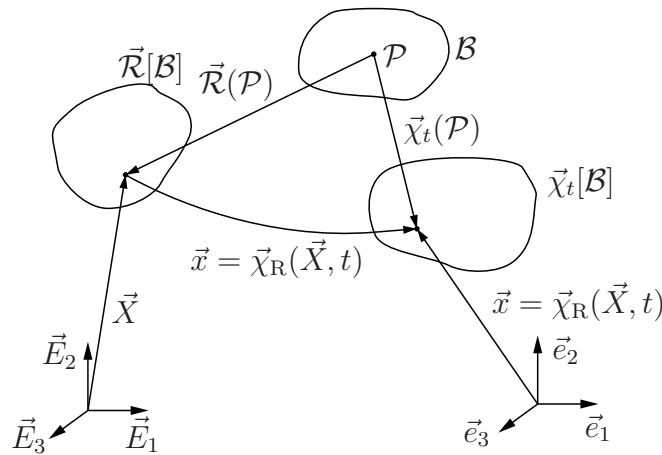


Abbildung 2.1: Konfigurationen

ausgegangen, dass ein Körper vor der mechanischen Belastung (d.h. zum Zeitpunkt $t = t_0$) durch die Referenzkonfiguration $\vec{\mathcal{R}} = \mathcal{B}_0$ beschrieben wird. Im Allgemeinen ist die Referenzkonfiguration allerdings beliebig. Zu anderen Zeiten als $t = t_0$ befindet sich der materielle Körper in der Momentankonfiguration \mathcal{B}_t und der Ort jedes materiellen Punktes des Körpers kann durch die Bewegung $\vec{x} = \vec{\chi}_R(\vec{X}, t)$ beschrieben werden. Der Ort des materiellen Punktes \mathcal{P} zum Ausgangszeitpunkt t_0 wird durch $\vec{X} = \vec{\chi}_R(\vec{X}, t_0)$ ausgedrückt. Von Bedeutung zur Beschreibung von Bewegungen und Deformationen des Körpers ist der Verschiebungsvektor

$$\vec{u} = \vec{x} - \vec{X} = \vec{\chi}_R(\vec{X}, t) - \vec{\chi}_R(\vec{X}, t_0). \quad (2.7)$$

2.1.2 Deformationsgradient

Die grundlegende Größe zur Beschreibung der Deformation eines Körpers \mathcal{B} ist der Deformationsgradient

$$\mathbf{F}(\vec{X}, t) = \text{Grad } \vec{\chi}_R(\vec{X}, t). \quad (2.8)$$

Dieser beschreibt die an einem materiellen Punkt \mathcal{P} auftretende Änderung der Bewegung benachbarter materieller Punkte. Der Deformationsgradient bildet das materielle Linienelement $d\vec{X}$ der Bezugsconfiguration auf das materielle Linienelement $d\vec{x}$ der Momentankonfiguration ab

$$d\vec{x} = \mathbf{F} d\vec{X}. \quad (2.9)$$

Auch die Abbildung eines materiellen Flächenelements $d\vec{A}_R$ bzw. Volumenelements dV_R der Referenzkonfiguration auf das materielle Flächen- bzw. Volumenelement der

Momentankonfiguration ($d\vec{a}$ bzw. dV) lässt sich mit Hilfe des Deformationsgradienten beschreiben

$$d\vec{a} = (\det \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} d\vec{A}_R, \quad (2.10)$$

$$dV = (\det \mathbf{F}) dV_R. \quad (2.11)$$

Üblicherweise wird die Determinante des Deformationsgradienten als Jacobideterminante J bezeichnet

$$J := \det \mathbf{F}. \quad (2.12)$$

Mit der Hilfe des Deformationsgradienten kann man verschiedene Verzerrungstensoren definieren, die unterschiedliche Vor- und Nachteile besitzen.³

2.1.3 Polare Zerlegung des Deformationsgradienten

Der Deformationsgradient \mathbf{F} beschreibt die Deformation des Körpers. Entgegen der anschaulichen Vorstellung beinhaltet diese Deformation nicht nur die Streckung der Umgebung eines materiellen Punktes, sondern auch eine reine Rotation. Diese Eigenschaft korrespondiert mit der Tatsache, dass sich jeder Tensor 2. Stufe polar zerlegen lässt. Der Deformationsgradient lässt sich z.B. nach Tadmor et al. (2011) oder Haupt (2002) in zwei Anteile zerlegen. Ein Anteil \mathbf{R} beschreibt die Rotation, wobei der formverändernde Anteil entweder durch den linken oder den rechten Strecktensor (\mathbf{V} bzw. \mathbf{U}) beschrieben werden kann

$$\mathbf{F} = \mathbf{R}\mathbf{U} = \mathbf{V}\mathbf{R}. \quad (2.13)$$

Die Tensoren \mathbf{R} , \mathbf{V} und \mathbf{U} haben die Eigenschaften

$$\mathbf{R}^{-1} = \mathbf{R}^T, \det \mathbf{R} = 1, \quad \mathbf{R} \text{ ist orthogonal} \quad (2.14)$$

$$\mathbf{U} = \mathbf{U}^T, \quad \mathbf{U} \text{ ist symmetrisch positiv definit} \quad (2.15)$$

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}^T, \quad \mathbf{V} \text{ ist symmetrisch positiv definit.} \quad (2.16)$$

Verzerrungsmaße

Zielsetzung der Kontinuumsmechanik ist eine einheitliche Darstellung von mathematischen Modellen, welche die Eigenschaften materieller Körper wiedergeben. Dafür benötigt man Verzerrungsmaße, die sich auf unterschiedliche Weisen definieren lassen. Dazu werden zwei weitere Tensoren benötigt, die an dieser Stelle definiert werden sollen. In Anlehnung an (Haupt, 2002) gilt für den rechten Cauchy-Green Tensor

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \mathbf{U}^2. \quad (2.17)$$

³Für weitere Informationen zu diesem Thema werden die Standardwerke von z.B. (Haupt, 2002) und (Holzapfel, 2000) empfohlen.

Der linke Cauchy-Green Tensor wird in der Form

$$\mathbf{B} = \mathbf{F}\mathbf{F}^T = \mathbf{V}^2 \quad (2.18)$$

verwendet. Damit lassen sich verschiedene Verzerrungsmaße entwickeln. Diese haben die Eigenschaft, dass sie bei einer reinen Starrkörperbewegung verschwinden und somit ausschließlich die Deformation des materiellen Körpers beschreiben. Zwei wichtige Verzerrungsmaße sind der Greensche Verzerrungstensor

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2}(\mathbf{F}^T\mathbf{F} - \mathbf{1}) = \frac{1}{2}(\mathbf{C} - \mathbf{1}) = \frac{1}{2}(\mathbf{U}^2 - \mathbf{1}) \quad (2.19)$$

und der Almansische Verzerrungstensor

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \mathbf{F}^{-1}\mathbf{F}^{-T}) = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \mathbf{B}^{-1}) = \frac{1}{2}(\mathbf{1} - \mathbf{V}^{-2}). \quad (2.20)$$

Der Greensche Verzerrungstensor lässt sich durch den Almansischen Verzerrungstensor ausdrücken und umgekehrt

$$\mathbf{A} = \mathbf{F}^{-T}\mathbf{E}\mathbf{F}^{-1}, \quad \mathbf{E} = \mathbf{F}^T\mathbf{A}\mathbf{F}. \quad (2.21)$$

Mit der Definition des materiellen Verschiebungsgradienten

$$\mathbf{H} = \text{Grad } \vec{u} \quad (2.22)$$

erhält man mit

$$\mathbf{F} = \mathbf{1} + \mathbf{H} \quad (2.23)$$

den Greenschen Verzerrungstensor

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{H} + \mathbf{H}^T + \mathbf{H}^T\mathbf{H}). \quad (2.24)$$

Für die Näherung kleiner Deformationen vernachlässigt man die Terme zweiter Ordnung, womit

$$\boldsymbol{\varepsilon} \approx \frac{1}{2} (\mathbf{H} + \mathbf{H}^T) \quad (2.25)$$

gilt.

Neben den Verzerrungen sind auch die Deformationsgeschwindigkeiten von Bedeutung. Dazu führt man den räumlichen Geschwindigkeitsgradienten \mathbf{L} ein

$$\mathbf{L} = \dot{\mathbf{F}}\mathbf{F}^{-1} = \text{grad } \vec{v}(\vec{x}, t). \quad (2.26)$$

Die zeitliche Änderung der materiellen Linien-, Flächen- und Volumenelemente kann man damit schreiben als

$$\frac{d}{dt} d\vec{x} = \mathbf{L} d\vec{x}, \quad (2.27)$$

$$\frac{d}{dt} d\vec{a} = ((\text{Sp } \mathbf{L}) \mathbf{1} - \mathbf{L}^T) d\vec{a}, \quad (2.28)$$

$$\frac{d}{dt} dV_R = (\text{Sp } \mathbf{L}) dV. \quad (2.29)$$

Dabei wurde unter anderem ausgenutzt, dass

$$\dot{J} = J\mathbf{F}^{-T} \cdot \dot{\mathbf{F}} = J(\text{Sp } \mathbf{L}) \quad (2.30)$$

gilt. Der räumliche Geschwindigkeitsgradient kann in einen symmetrischen und einen antisymmetrischen Anteil zerlegt werden

$$\mathbf{D} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{L}^T) \quad \text{und} \quad \mathbf{W} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{L}^T). \quad (2.31)$$

\mathbf{D} ist der Verzerrungsgeschwindigkeitstensor und \mathbf{W} der Wirbeltensor. Der Zusammenhang zum Cauchy-Green Tensor ergibt sich zu

$$\mathbf{D} = \mathbf{F}^{-T} \dot{\mathbf{E}} \mathbf{F}^{-1}. \quad (2.32)$$

2.1.4 Zerlegung des Deformationsgradienten

Abgesehen von der in Abschnitt 2.1.3 vorgestellten Zerlegung des Deformationsgradienten, kann dieser auch durch eine andere Motivation zerlegt werden. Dabei ist die Art und Motivation einer solchen Zerlegung meist von der zugrunde liegenden Problemstellung abhängig. Zum Beispiel kann man den Deformationsgradienten in einen volumenhaltenden und einen volumenändernden Anteil oder in einen elastischen und inelastischen Anteil zerlegen. Eine Zerlegung in mehr als zwei Anteile ist ebenfalls denkbar.

Elastisch-plastische Zerlegung

Die Zerlegung in einen plastischen Anteil \mathbf{F}_p und einen elastischen Anteil \mathbf{F}_e wird in einer Vielzahl von Arbeiten angewandt

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_e \mathbf{F}_p. \quad (2.33)$$

Diese multiplikative Zerlegung wurde zuerst von Eckart (1948) vorgeschlagen und von Lee (1969) im elastoplastischen Bereich angewendet. Lu und Pister (1975) entwickelten diese Idee für thermomechanische Fragestellungen weiter.

Volumenerhaltende und -ändernde Zerlegung

Eine weitere Zerlegung des Deformationsgradienten ist die Zerlegung in einen volumen-erhaltenden Anteil $\hat{\mathbf{F}}$ und einen volumenverändernden Anteil $\bar{\mathbf{F}}$. Es gilt

$$\mathbf{F} = \hat{\mathbf{F}} \bar{\mathbf{F}} \quad (2.34)$$

mit

$$\hat{\mathbf{F}} = J^{\frac{1}{3}} \mathbf{1} \quad \text{und} \quad \bar{\mathbf{F}} = J^{-\frac{1}{3}} \mathbf{F}. \quad (2.35)$$

Für deren Determinanten folgt

$$\det \bar{\mathbf{F}} = \det \mathbf{F} = J \quad \text{und} \quad \det \hat{\mathbf{F}} = 1. \quad (2.36)$$

Mit $\det \mathbf{R} = 1$ und $\det \mathbf{U} = \det \mathbf{V} = \det \mathbf{F}$ kann man die Verbindung zur polaren Zerlegung erkennen und analog definieren

$$\bar{\mathbf{U}} = (\det \mathbf{U})^{-\frac{1}{3}} \mathbf{U} = J^{-\frac{1}{3}} \mathbf{U}, \quad (2.37)$$

$$\bar{\mathbf{V}} = (\det \mathbf{V})^{-\frac{1}{3}} \mathbf{V} = J^{-\frac{1}{3}} \mathbf{V}, \quad (2.38)$$

was zur polaren Zerlegung des volumenerhaltenden Anteils führt

$$\bar{\mathbf{F}} = \mathbf{R} \bar{\mathbf{U}} = \bar{\mathbf{V}} \mathbf{R}. \quad (2.39)$$

Der unimodulare rechte und linke Cauchy-Green Tensor lässt sich damit ähnlich wie in Gleichung (2.17) und (2.18) definieren

$$\bar{\mathbf{C}} = \bar{\mathbf{F}}^T \bar{\mathbf{F}} = \bar{\mathbf{U}}^2 \quad \text{und} \quad \bar{\mathbf{B}} = \bar{\mathbf{F}} \bar{\mathbf{F}}^T = \bar{\mathbf{V}}^2. \quad (2.40)$$

2.2 Mechanische Spannungen

Mechanische Spannungen entstehen, wenn an einem materiellen Körper Kräfte angreifen; ob diese Kräfte äußere Kräfte sind oder in Folge einer Behinderung in der Formänderung des Körpers auftreten, spielt dabei keine Rolle. Innerhalb eines solchen belasteten materiellen Körpers bilden sich mechanische Spannungen aus. Sie werden durch den sogenannten Spannungsvektor $\vec{t}(t, \vec{x}, \vec{n})$ beschrieben. Bei einem Freischnitt entlang einer Oberfläche wirkt eine Oberflächenkraft, deren infinitesimaler Anteil $\vec{t} da$ beträgt, vgl. Abbildung 2.2. Zwischen der Normalen \vec{n} des Flächenelementes da und dem Spannungsvektor. Die Verknüpfung davon beschreibt das Cauchy-Theorem (siehe (Ogden, 1997; Haupt, 2002; Truesdell und Noll, 2004))

$$\vec{t}(t, \vec{x}, \vec{n}) = \mathbf{T}(\vec{x}, t) \vec{n}. \quad (2.41)$$

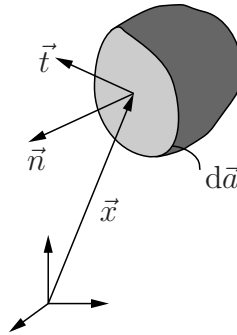


Abbildung 2.2: Freischnitt eines materiellen Körpers an der Stelle \vec{x}

Der Tensor \mathbf{T} wird Cauchy Spannungstensor genannt. Er beinhaltet Normalspannungen in die entsprechenden Richtungen des Basissystems sowie Scherspannungen. Oft werden die im Cauchy-Spannungstensor enthaltenen Spannungen auch als wahre Spannungen bezeichnet. Wie der spezielle Name schon andeutet, existiert eine Zahl an weiteren Spannungstensoren, die für die Modellierung konstitutiver Modelle von Bedeutung sind.

Bezieht man die resultierende Kraftdichte anstatt auf das Flächenelement da der Momentankonfiguration auf das Flächenelement der Referenzkonfiguration dA mit dem Normalenvektor \vec{n}_R , so erhält man eine ähnliche Beziehung

$$\vec{t}_R = \mathbf{T}_R \vec{n}_R. \quad (2.42)$$

Der Spannungsvektor \vec{t}_R wird Piola-Kirchhoff Spannungsvektor genannt. Dementsprechend handelt es sich bei \mathbf{T}_R um den ersten Piola-Kirchhoff Spannungstensor. Die beiden Tensoren \mathbf{T} und \mathbf{T}_R lassen sich ineinander überführen

$$\mathbf{T}_R = J \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T}. \quad (2.43)$$

Ein weiterer wichtiger Tensor ist der zweite Piola-Kirchhoff Spannungstensor $\tilde{\mathbf{T}}$, der über die Beziehung

$$\tilde{\mathbf{T}} = J \mathbf{F}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{F}^{-T} \quad (2.44)$$

mit dem Cauchy-Spannungstensor in Verbindung steht. Dieser bezieht die Spannungen der Referenzkonfiguration auf das Flächenelement selbiger. Weiterhin werden teilweise die Kirchhoff-Spannungen

$$\mathbf{S} = J \mathbf{T} \quad (2.45)$$

verwendet. Alle Spannungstensoren lassen sich ineinander transformieren. Dies ist in Tabelle 2.1 dargestellt.

Tabelle 2.1: Transformation von Spannungstensoren

	\mathbf{T}	\mathbf{S}	\mathbf{T}_R	$\tilde{\mathbf{T}}$
\mathbf{T}		$J^{-1}\mathbf{S}$	$J^{-1}\mathbf{T}_R\mathbf{F}^T$	$J^{-1}\mathbf{F}\tilde{\mathbf{T}}\mathbf{F}^{-1}$
\mathbf{S}	$J\mathbf{T}$		$\mathbf{T}_R\mathbf{F}^T$	$\mathbf{F}\tilde{\mathbf{T}}\mathbf{F}^T$
\mathbf{T}_R	$J\mathbf{T}\mathbf{F}^{-T}$	$\mathbf{S}\mathbf{F}^{-T}$		$\mathbf{F}\tilde{\mathbf{T}}$
$\tilde{\mathbf{T}}$	$J\mathbf{F}^{-1}\mathbf{T}\mathbf{F}^{-T}$	$\mathbf{F}^{-1}\mathbf{S}\mathbf{F}^{-T}$	$\mathbf{F}^{-1}\mathbf{T}_R$	

2.3 Bilanzgleichungen der Mechanik

Das maßgebliche Verhalten aller physikalischer Körper kann durch die Bilanzgleichungen der Mechanik beschrieben werden. Diese Bilanzgleichungen basieren auf Erfahrungen und haben einen axiomatischen Charakter, d.h. sie können nicht bewiesen werden. Sie geben einen Zusammenhang über die den Zustand eines materiellen Körpers beschreibenden Größen wieder. Es handelt sich dabei um die Massenbilanz, Impulsbilanz, Drehimpulsbilanz, Energie- und Entropiebilanz.

Ziel dieser Arbeit ist nicht die genaue Herleitung dieser bekannten Sätze, daher werden diese nur kurz umrissen und angegeben, eine umfassende Behandlung der Bilanzgleichungen findet sich in den Standardbüchern wie z.B. (Haupt, 2002), (Lemaitre und Chaboche, 1990) oder (Holzapfel, 2000). Sämtliche Ausdrücke werden in der Momentankonfiguration angegeben.

2.3.1 Massenbilanz

In einem abgeschlossenen System bleibt die Masse

$$m(\mathcal{B}, t) = \int_v \rho(\vec{x}, t) dV = \int_{V_R} \rho_R(\vec{X}) dV_R \quad (2.46)$$

definitionsgemäß konstant, $\dot{m}(\mathcal{B}, t) = 0$. Die Massendichte wird durch $\rho(\vec{x}, t)$ bezeichnet. Mit der Geschwindigkeit $\vec{v}(\vec{x}, t)$ lautet die Massenbilanz

$$\frac{d}{dt} \rho(\vec{x}, t) + \rho \operatorname{div} \vec{v}(\vec{x}, t) = 0. \quad (2.47)$$

Daraus lässt sich die Beziehung für die Dichte ρ_R der Referenzkonfiguration

$$\rho_R = \rho \det \mathbf{F} \quad (2.48)$$

ableiten.

2.3.2 Impulsbilanz

Der Impuls $\vec{p}(\mathcal{B})$ eines materiellen Körpers wird definiert durch das Integral über das Produkt aus der Massendichte ρ und der Geschwindigkeit \vec{v} aller materiellen Punkte.

$$\vec{p}(\mathcal{B}, t) = \int_v \vec{v}(\vec{x}, t) \rho(\vec{x}, t) dV = \int_{V_R} \vec{v}(\vec{X}, t) \rho_R(\vec{X}) dV_R \quad (2.49)$$

Die Impulsbilanz sagt aus, dass die Impulsänderung gleich den von außen angreifenden Kräften ist, d.h.

$$\frac{d}{dt} \vec{p}(\mathcal{B}, t) = \int_a \vec{t}(\vec{x}, t) da + \int_v \vec{k}(\vec{x}, t) \rho(\vec{x}, t) dV. \quad (2.50)$$

Unter Verwendung von Gleichung (2.41) lässt sich in räumlicher Darstellung zeigen, dass die lokale Formulierung

$$\operatorname{div} \mathbf{T}(\vec{x}, t) + \rho \vec{k} = \rho \frac{d}{dt} \vec{v}(\vec{x}, t) \quad (2.51)$$

lautet. In materieller Darstellung nimmt Gleichung (2.51) die Form

$$\operatorname{Div} \mathbf{T}_R(\vec{X}, t) + \rho_R(\vec{X}) \vec{k}(\vec{X}, t) = \rho_R \frac{d}{dt} \vec{v}(\vec{X}, t) \quad (2.52)$$

an.

2.3.3 Drehimpulsbilanz

Der Drehimpulssatz verknüpft die Änderung des Drehimpulses $\vec{D}_{\vec{c}}$ mit von außen am Körper angreifenden Momenten. Mit der Definition

$$\vec{D}_{\vec{c}}(\mathcal{B}, t) = \int_v (\vec{x} - \vec{c}) \times \vec{v} \rho dV \quad (2.53)$$

des Drehimpulses $\vec{D}_{\vec{c}}(\mathcal{B}, t)$ bezogen auf einen beliebigen Bezugspunkt \vec{c} ist die Drehimpulsbilanz definiert als

$$\dot{\vec{D}}_{\vec{c}} = \vec{M}_{\vec{c}} \quad (2.54)$$

bzw.

$$\frac{d}{dt} \int_v (\vec{x} - \vec{c}) \times \vec{v} \rho dV = \int_a (\vec{x} - \vec{c}) \times \vec{t} da + \int_v (\vec{x} - \vec{c}) \times \vec{k} \rho dV. \quad (2.55)$$

Daraus folgt die Symmetrie des Cauchy-Spannungstensors \mathbf{T}

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^T. \quad (2.56)$$

2.3.4 Energiebilanz - erster Hauptsatz der Thermodynamik

Die kinetische Energie

$$K(\mathcal{B}, t) = \int_v \frac{1}{2} \vec{v} \cdot \vec{v} \rho \, dV \quad (2.57)$$

führt mit der inneren Energie

$$E(\mathcal{B}, t) = \int_v e \rho \, dV \quad (2.58)$$

und der darin enthaltenen spezifischen inneren Energie e auf die Energiebilanz

$$\frac{d}{dt} (K(\mathcal{B}, t) + E(\mathcal{B}, t)) = L(\mathcal{B}, t) + Q(\mathcal{B}, t). \quad (2.59)$$

Die zeitliche Ableitung aus der Summe der kinetischen und der inneren Energie entspricht der Summe der Leistung der äußeren Kräfte $L(\mathcal{B}, t)$ (mechanischer Anteil) und der Wärme $Q(\mathcal{B}, t)$ (nichtmechanischer Anteil). In der räumlichen Darstellung lautet die Bilanzgleichung der inneren Energie (vgl. (Haupt, 2002))

$$\frac{d}{dt} e(\vec{x}, t) = -\frac{1}{\rho} \operatorname{div} \vec{q}(\vec{x}, t) + r(\vec{x}, t) + \frac{1}{\rho} \mathbf{T} \cdot \mathbf{D}. \quad (2.60)$$

Dabei sind $\vec{q}(\vec{x}, t)$ der Wärmeflussvektor und $r(\vec{x}, t)$ eine volumenhaft verteilte Wärmequelle.

2.3.5 Entropiebilanz - zweiter Hauptsatz der Thermodynamik

Die grundlegende Aussage des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik besteht unter Verwendung der Größe der Entropie S als Maß für die quantitative Erfassung der Irreversibilität von Prozessen darin, dass die Entropie eines abgeschlossenen Systems sich nie verringern kann.

Die Entropie $S(\mathcal{B}, t)$ ist definiert als das Integral über die Entropiedichte $s(\vec{x}, t)$

$$S(\mathcal{B}, t) = \int_v s(\vec{x}, t) \rho(\vec{x}, t) \, dV. \quad (2.61)$$

Sie kann einem System u.a. durch Wärmeaustausch zu- oder abgeführt werden, was durch den Term

$$H(\mathcal{B}, t) = \int_a \Sigma \, d\vec{a} + \int_v \sigma \rho \, dV \quad (2.62)$$

ausgedrückt wird. Dabei ist $\Sigma = \vec{q}/\theta \cdot \vec{n}$ die oberflächenverteilte Entropiezufuhr, \vec{q} der Wärmeflussvektor und θ die absolute Temperatur. Analog ist die volumenhaft verteilte Entropiezufuhr definiert als $\sigma = r/\theta$. Mit der nicht negativen Entropieproduktion wird zudem Entropie in der Form

$$\hat{\Gamma} = \int_v \gamma \rho dV \geq 0 \quad (2.63)$$

generiert.

Die Entropiebilanz sagt aus, dass die zeitliche Änderung der Entropie die Summe dieser beiden Terme ist

$$\frac{d}{dt}S = H + \hat{\Gamma}, \quad (2.64)$$

bzw. dass die Entropieproduktion Γ niemals negativ sein kann, d.h.

$$\hat{\Gamma} = \dot{S} - H \geq 0. \quad (2.65)$$

Daraus lässt sich die spezielle Form der Entropieungleichung herleiten

$$\gamma = \dot{s} + \frac{1}{\rho\theta} (\text{div } \vec{q} - \rho r) - \frac{1}{\rho\theta^2} \vec{q} \cdot \text{grad } \theta \geq 0, \quad (2.66)$$

die in Form der Clausius-Duhem-Ungleichung

$$-\dot{\psi} - s\dot{\theta} + \frac{1}{\rho} \mathbf{T} \cdot \mathbf{D} - \frac{1}{\rho\theta} \vec{q} \cdot \text{grad } \theta \geq 0 \quad (2.67)$$

eine bedeutende Rolle für die Materialmodellierung spielt. Hinweise dazu finden sich u.a. in (Haupt, 2002).

2.4 Materialmodelle

Alle Materialien zeichnen sich durch bestimmte Eigenschaften aus. Diese Eigenschaften hängen nicht nur von der atomaren Zusammensetzung ab, sondern können u.a. auch von der Vorgeschichte des Materials beeinflusst werden. Das Ziel der Kontinuumsmechanik ist dabei nicht, die einzelnen Attribute zu beschreiben, sondern durch das Auffassen des Materials als Kontinuum das Verhalten als Ganzes mathematisch zu modellieren. Die dafür notwendigen Gleichungen nennt man konstitutive Gleichungen bzw. Materialmodelle. Grundsätzlich ist man im Zuge der Materialmodellierung an einem Zusammenhang zwischen den Verzerrungen \mathbf{E} bzw. dem rechten Cauchy-Green Tensor \mathbf{C} und den Spannungen $\tilde{\mathbf{T}}$ interessiert. Das konstitutive Modell muss daher eine Beziehung der Form

$$\tilde{\mathbf{T}}(\vec{X}, t) = \tilde{\mathbf{h}}(\mathbf{C}(\vec{X}, t)) \quad (2.68)$$

bereitstellen. Diese muss keineswegs ausreichend für die Beschreibung des Modells sein. Weitere konstitutive Gleichungen sind denkbar. So beschreiben Materialmodelle vom inneren Variablentyp auch das geschichtsabhängige Materialverhalten mit Hilfe von gewöhnlichen Differentialgleichungen erster Ordnung.

$$\tilde{\mathbf{T}}(\vec{X}, t) = \tilde{\mathbf{h}}(\mathbf{C}(\vec{X}, t), \mathbf{q}(\vec{X}, t)) \quad (2.69)$$

$$\dot{\mathbf{q}}(\vec{X}, t) = \mathbf{r}(\mathbf{C}(\vec{X}, t), \mathbf{q}(\vec{X}, t)), \quad (2.70)$$

siehe (Coleman und Gurtin, 1967). Mit Hilfe dieser Modelle, den Bilanzgleichungen der Mechanik sowie der Beschreibung der Kinematik kann das Verhalten des Körpers beschrieben werden.

Hyperelastizität

Als Erweiterung der linearen Elastizität für große Deformationen beschreibt die Hyperelastizität zu einem großen Teil Werkstoffe wie Elastomere. Für den Fall der Hyperelastizität kann diese u.a. die Form

$$\tilde{\mathbf{T}} = 2\rho_R \frac{d\psi(\mathbf{C})}{d\mathbf{C}} \quad (2.71)$$

annehmen. Dabei ist $\psi(\mathbf{C})$ die spezifische Formänderungsenergie und ρ_R die Dichte.

Viskoplastizität

Eine Möglichkeit der Darstellung von Materialmodellen vom inneren Variablen-Typ repräsentiert das Modell der von Mises-Plastizität. Dabei hängt das Verhalten des Materials neben dem Verzerrungsmaß auch von den inneren Variablen $\mathbf{q} = \{q_1, \dots, q_n\}$ ab, siehe Gleichungen (2.69) und (2.70). Beispielsweise bestimmen die inneren Variablen bei viskoplastischen Materialmodellen neben einer Elastizitätsbeziehung

$$\mathbf{T} = K(\text{Sp } \mathbf{E})\mathbf{1} + 2G(\mathbf{E} - \mathbf{E}_v)^D \quad (2.72)$$

das "Gedächtnis" des plastischen Materials. Die inneren Variable (hier \mathbf{E}_v und \mathbf{X}) können sich in Form von Evolutionsgleichungen entwickeln

$$\dot{\mathbf{E}}_v = \frac{1}{\eta} \left\langle \frac{F}{\sigma_0} \right\rangle^r \mathbf{N}, \quad (2.73)$$

$$\dot{\mathbf{X}} = \frac{1}{\eta} \left\langle \frac{F}{\sigma_0} \right\rangle^r \left(c\mathbf{N} - b\sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{X} \right), \quad (2.74)$$

welche numerisch mit Hilfe von Zeitintegrationsverfahren berechnet werden.

Weitere Möglichkeiten der Beschreibung von Materialmodellen sind in Hinblick auf diese Arbeit weniger von Bedeutung. Als Möglichkeiten seien an dieser Stelle die Darstellung in integraler Form oder über Funktionale genannt, siehe z.B. (Haupt, 2002), (Altenbach und Altenbach, 1994).

3 Finite Elemente

Das folgende Kapitel befasst sich mit der Lösung des Anfangsrandwertproblems mit Hilfe der Methode der finiten Elemente. Dabei werden die grundlegenden Gedanken zur Lösung vorgestellt.

Die Anwendung der vertikalen Linienmethode (Schiesser, 1991) führt zu einer separaten Diskretisierung des Raumes und der Zeit und damit auf ein DAE-System (siehe (Fritzen, 1997; Wittekindt, 1991)), welches mit Hilfe von numerischen Methoden gelöst werden muss. Für eine Diskretisierung des Raumes mit Hilfe der Methode der finiten Elemente wird für lineare Probleme z.B. in (Bathe, 2002), (Hughes, 2000) oder (Zienkiewicz und Taylor, 2005) ausführlich untersucht. Nichtlineare Verfahren werden u.a. in (Wriggers, 2008) und (Belytschko et al., 2000) behandelt. Die Zeitintegration wird in dieser Arbeit mit Hilfe von diagonal-impliziten Runge-Kutta Methoden (vgl. (Hairer und Wanner, 1996)) durchgeführt. Die Anwendung von Runge-Kutta Verfahren wird z.B. in (Ellsiepen und Hartmann, 2001) gezeigt.

3.1 Das Anfangsrandwertproblem

Die im vorhergehenden Kapitel angesprochenen Bilanzgleichungen sowie die Kinematik liefern zusammen mit den konstitutiven Gleichungen eines Materialmodells einen Satz an Gleichungen, die gelöst werden müssen, um das Verhalten eines konkreten Problems zu beschreiben. Dies ist analytisch in den meisten Fällen nicht durchführbar. Es handelt sich um ein Anfangsrandwertproblem, zu dessen Lösung in dieser Arbeit die Methode der finiten Elemente herangezogen werden soll.

Die Auswertung der Impulsbilanz (2.51) ist ein solches Problem. Für den quasi-statischen Fall verschwindet die Zeitableitung auf der rechten Seite, womit

$$\operatorname{div} \mathbf{T}(\vec{x}, t) + \rho \vec{k} = \vec{0} \quad (3.1)$$

folgt. In materieller Darstellung ändert sich diese zu

$$\operatorname{Div} \mathbf{T}_R(\vec{X}, t) + \rho_R \vec{k} = \vec{0}. \quad (3.2)$$

Die darin enthaltenen Spannungen \mathbf{T}_R werden über den Zusammenhang des ersten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensors mit dem zweiten Piola-Kirchhoffschen Spannungstensor

$$\mathbf{T}_R(\vec{X}, t) = \mathbf{F}(\vec{X}, t) \tilde{\mathbf{T}}(\vec{X}, t) \quad (3.3)$$

durch Materialgleichungen beschrieben. Diese haben die Struktur

$$\tilde{\mathbf{T}}(\vec{X}, t) = \tilde{\mathbf{h}}(\mathbf{C}(\vec{X}, t), \mathbf{q}(\vec{X}, t)). \quad (3.4)$$

Die zugehörigen Evolutionsgleichungen der inneren Variablen $\mathbf{q}(\vec{X}, t)$ lauten

$$\dot{\mathbf{q}}(\vec{X}, t) = \tilde{\mathbf{r}}(\mathbf{C}(\vec{X}, t), \mathbf{q}(\vec{X}, t)). \quad (3.5)$$

Eine große Anzahl an Materialmodellen besitzt diese aus einer Elastizitätsbeziehung (3.4) und den Evolutionsgleichungen (3.5) bestehende Struktur. Zusätzlich sind zur Formulierung des Anfangsrandwertproblems Rand- und Anfangsbedingungen der vorhandenen Größen notwendig. Die Anfangsbedingungen sind formuliert als

$$\mathbf{q}(\vec{X}, t_0) = \mathbf{q}_0(\vec{X}) \in \Omega, \quad (3.6)$$

$$\vec{u}(\vec{X}, t_0) = \vec{u}_0(\vec{X}). \quad (3.7)$$

Die inneren Variablen hängen zu Beginn ausschließlich vom Ort ab. Die Anfangsbedingungen hinsichtlich des Verschiebungsfeldes müssen die Randbedingungen erfüllen. Im hier vorliegenden Fall der Statik werden die Trägheitsterme von Gleichung (2.51) vernachlässigt. Die Berandung $\partial\Omega$ des Körpers \mathcal{B} kann in verschiedene Teilberandungen aufgeteilt werden. $\partial_u\Omega$ bezeichnet einen Teilrand, an dem die Verschiebungen $\vec{u}(\vec{X}, t)$ vorgegeben sind. Zudem sind auf dem Rand $\partial_s\Omega$ vorgegeben Spannungsrandbedingungen denkbar. Beide Arten von Randbedingungen schließen sich aus, d.h. es können entweder Spannungs- oder Verschiebungsrandbedingungen vorgegeben werden

$$\partial_u\Omega \cup \partial_s\Omega = \partial\Omega, \quad \partial_u\Omega \cap \partial_s\Omega = \emptyset. \quad (3.8)$$

Auf dem Rand formuliert man Dirichlet- oder Neumann-Randbedingungen, d.h.

$$\vec{u}(\vec{X}, t) = \vec{\bar{u}}(\vec{X}, t) \quad \vec{X} \in \partial_u\Omega \quad (3.9)$$

$$\vec{t}_R = \mathbf{T}_R \vec{n}_R = \vec{t}(\vec{X}, t) \quad \vec{X} \in \partial_s\Omega. \quad (3.10)$$

Das Anfangsrandwertproblem besteht aus der Kopplung zwischen einem Randwertproblem (3.4) und einem Anfangswertproblem (3.5). Es ist im Allgemeinen nicht analytisch lösbar. Daher ist eine numerische Näherung notwendig. Zusammengefasst ist das Anfangsrandwertproblem in Tabelle 3.1 dargestellt.

Gesucht wird das Verschiebungsfeld $\vec{u}(\vec{X}, t)$	
$\vec{0} = \text{Div } \mathbf{T}_R(\vec{X}, t) + \rho_R \vec{k}$	(3.2)
Materialgleichungen	
$\tilde{\mathbf{T}}(\vec{X}, t) = \tilde{\Phi}(\mathbf{C}(\vec{X}, t), \mathbf{q}(\vec{X}, t))$	(3.4)
$\dot{\mathbf{q}}(\vec{X}, t) = \tilde{\mathbf{r}}(\mathbf{C}(\vec{X}, t), \mathbf{q}(\vec{X}, t))$	(3.5)
Anfangs- und Randbedingungen	
$\mathbf{q}(\vec{X}, t) = \mathbf{q}_0(\vec{X}), \quad \vec{u}(\vec{X}, t_0) = \vec{u}_0(\vec{X})$	(3.6, 3.7)
$\vec{u}(\vec{X}, t) = \vec{u}(\vec{X}, t), \quad \mathbf{T}_R \vec{n}_R = \vec{s}(\vec{X}, t)$	(3.9, 3.10)

Tabelle 3.1: Das Anfangsrandwertproblem der Kontinuumsmechanik

Die schwache Formulierung der Impulsbilanz

Die Überführung der Impulsbilanz (3.2) in die schwache Formulierung erfolgt im Allgemeinen über das Prinzip der virtuellen Verschiebungen. Dabei werden virtuelle Verschiebungen $\delta \vec{u}$ skalar mit Gleichung (3.2) multipliziert und anschließend über das gesamte Volumen integriert

$$\int_{\Omega} \left(\text{div } \mathbf{T}_R(\vec{X}, t) \cdot \delta \vec{u} + \rho_R \vec{k} \cdot \delta \vec{u} \right) d\Omega = 0. \quad (3.11)$$

Mit dem Cauchy-Theorem

$$\mathbf{T}_R \vec{n}_R = \vec{t}_R \quad (3.12)$$

sowie Gleichung (3.3) kann man zeigen, dass

$$\int_{\Omega} \tilde{\mathbf{T}} \cdot \delta \mathbf{E} d\Omega = \int_{\partial\Omega} \vec{t}_R \cdot \delta \vec{u} d\partial\Omega + \int_{\Omega} \rho_R \vec{k} \cdot \delta \vec{u} d\Omega \quad (3.13)$$

gilt. Dies ist die schwache Formulierung der Impulsbilanz. Eine ausführliche Herleitung davon ist z.B. in (Netz, 2013) oder (Quint, 2012) nachzulesen. Die virtuellen Verzerrungen $\delta \mathbf{E}$ beschreiben die Variation des Greenschen Verzerrungstensors. Sie sind gegeben durch

$$\delta \mathbf{E} = \frac{1}{2} \left(\mathbf{F}^T \text{Grad } \delta \vec{u} + (\text{Grad } \delta \vec{u})^T \mathbf{F} \right). \quad (3.14)$$

Alternativ kann man in räumlicher Darstellung schreiben

$$\int_{\omega} \mathbf{T}(\vec{x}, t) \cdot \text{grad } \delta \vec{u} \, d\omega = \int_{\partial\omega} \vec{t}(\vec{x}, t) \cdot \delta \vec{u} \, d\omega + \int_{\omega} \rho(\vec{x}, t) \vec{k}(\vec{x}, t) \cdot \delta \vec{u} \, d\omega. \quad (3.15)$$

3.2 Raumdiskretisierung

3.2.1 Vertikale Linienmethode

Die vertikale Linienmethode ist eine zur Lösung von Anfangsrandwertproblemen angewendete Technik, bei der alle Variablen bis auf eine (dies ist in vielen Fällen die Zeit t) räumlich diskretisiert werden und so die partielle Differentialgleichung in ein System von gewöhnlichen Differentialgleichungen überführt wird, siehe (Schiesser, 1991). Man kann zeigen, dass es sich bei diesem System von Differentialgleichungen im Zusammenhang mit der Methode der finiten Elemente um ein Algebro-Differentialgleichungssystem (engl. differential-algebraic equations - DAE) handelt. Dies ist der Fall, wenn es sich um ein quasistatisches Problem mit Evolutionsgleichungen handelt. In z.B. (Brenan et al., 1996), (Ascher und Petzold, 1998), (Hairer et al., 1993), (Hairer und Wanner, 1996) sowie (Rentrop et al., 1995) werden verschiedene Lösungsansätze für Systeme von Algebro-Differentialgleichungen vorgestellt.

Durch die Anwendung der vertikalen Linienmethode ist es möglich, neben z.B. dem verbreiteten Newton-Raphson Verfahren auch Zeitintegrationsverfahren höherer Ordnung zu verwenden. So können in der Finiten-Elemente Methode diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren verwendet werden, vergleiche (Ellsiepen und Hartmann, 2001), (Hartmann, 2002), (Bier und Hartmann, 2006), (Hartmann et al., 2008). Auch die Anwendung von halb-expliziten Runge-Kutta Verfahren und ein Vergleich mit anderen Verfahren aus der Klasse der Runge-Kutta Verfahren findet sich in (Rothe et al., 2012). Linear-implizite Runge-Kutta Verfahren vom Rosenbrock-Typ (Rosenbrock, 1963) werden in (Hamkar, 2013) untersucht und angewendet. Neben diesen Einschrittverfahren, sind auch Mehrschrittverfahren auf die Problemstellungen der Plastizitäts- und Visko-plastizitätstheorie anwendbar, (Kirchner und Simeon, 1999), (Eckert et al., 2004).

3.2.2 Räumliche Diskretisierung

Zur Berechnung mit Hilfe der Methode der finiten Elemente, wird der materielle Körper in diskrete Gebiete zerlegt. Diese stellt die aktuell am häufigsten verwendete Methodik dar, um die zuvor genannte Problematik zu behandeln. Dies ist der Fall, da sie sich in der Praxis besonders bei Problemen der Elastizität und Plastizität auch bei komplexeren Geometrien flexibel und stabil verhält. Grundlegende mathematische Erläuterungen dazu finden sich z.B. in den Werken von (Hughes, 2000), (Bathe, 2002) oder (Zienkiewicz und Taylor, 2005).

Das den dreidimensionalen Raum einnehmende Gebiet Ω des materiellen Körpers \mathcal{B} wird in n_e bestimmte Bereiche, sogenannte finite Elemente Ω^e , und der Rand $\partial\Omega$ von \mathcal{B} in stückweise stetige Ränder Γ^e zerlegt, dies ist in Abbildung 3.1 beispielhaft für zwei Dimensionen skizziert. Wird die Approximation von \mathcal{B} mit \mathcal{B}^h bezeichnet, so gilt

$$\mathcal{B} \approx \mathcal{B}^h = \bigcup_{e=1}^{n_e} \Omega^e, \quad \text{sowie analog} \quad \partial\mathcal{B} \approx \partial\mathcal{B}^h = \bigcup_{e=1}^{n_e} \Gamma^e. \quad (3.16)$$

Der Exponent h soll in dieser Schreibweise andeuten, dass es sich um eine Approximation durch ein zugrundeliegendes Netz an Elementen mit einer charakteristischen Länge h handelt.

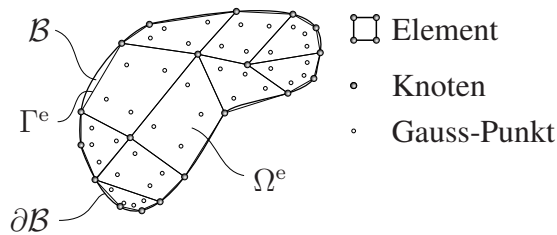


Abbildung 3.1: Diskretisierung am Beispiel eines zweidimensionalen Körpers

Im Zuge der Methode der finiten Elemente werden die Geometrie als auch andere Feldgrößen durch identische Ansatzfunktionen an den Knotenpunkten des Finite-Elemente-Netzes identifiziert.

Die Unterscheidung zwischen den Elementen in der Referenzkonfiguration Ω^e und in der Momentankonfiguration ω^e findet, wie auch in Kapitel 2, durch eine Unterscheidung in Groß- und Kleinbuchstaben statt. Man kann Gleichung (3.16) auch formulieren als

$$\mathcal{B} \approx \mathcal{B}^h = \bigcup_{e=1}^{n_e} \omega^e, \quad \text{und} \quad \partial\mathcal{B} \approx \partial\mathcal{B}^h = \bigcup_{e=1}^{n_e} \gamma^e. \quad (3.16^*)$$

Einheitselement

Grundlegender Bestandteil der Finite-Elemente Methode ist die Existenz eines abstrakten Einheitselements Ω_{\square} mit den Koordinaten $\xi = \{\xi, \eta, \zeta\} \in \Omega_{\square}$. Zur eigentlichen Berechnung werden die einzelnen Elemente Ω^e bzw. ω^e auf dieses Einheitselement eineindeutig abgebildet. Die Determinante der Jacobi-Matrix $J^e = \det(\partial\mathbf{X}/\partial\xi)$ bzw. $j^e = \det(\partial\mathbf{x}/\partial\xi)$ der zugehörigen Transformation muss positiv sein. Beispielhaft sind diese Transformationen in Abbildung 3.2 dargestellt.

Übergang zu finiten Elementen

Bei der Approximation der Feldgrößen findet eine Transformation der zugehörigen Vektoren statt. Der geometrische Vektor \vec{x} mit der Basis $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$ und $\vec{x} = x_i \vec{e}_i$ wird durch

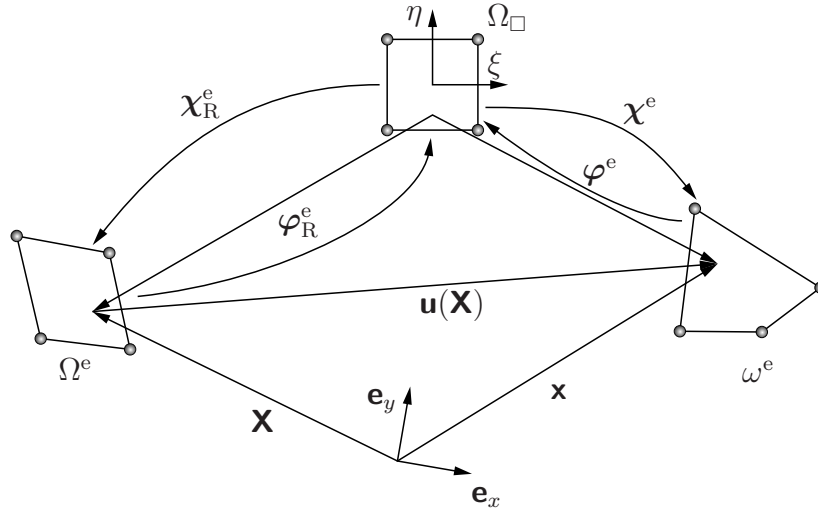


Abbildung 3.2: Transformationen in der Methode der finiten Elemente

einen nichtgeometrischen Vektor \mathbf{x} repräsentiert. Da man im Folgenden die zugehörige Basis nicht mehr wechselt, ist dieser Übergang gerechtfertigt und ermöglicht ein leichteres Verständnis beim Aufbau der finiten Elemente. In der Methode der finiten Elemente findet eine Unterscheidung zwischen globalen \mathbf{X} und lokalen \mathbf{x} Größen statt, dies wird in der Notation entsprechend unterschieden.

Das Verschiebungsfeld $\vec{u}(\vec{x}, t)$ wird mit Hilfe von Ansatzfunktionen approximiert. Es hat die Form

$$\vec{u}(\vec{x}, t) \approx \mathbf{u}^h(\mathbf{x}, t) = \sum_{j=1}^{n_n} N_j(\mathbf{x}) \mathbf{u}_j(t) \quad (3.17)$$

$$\delta \vec{u}(\vec{x}) \approx \delta \mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^{n_n} N_j(\mathbf{x}) \delta \mathbf{u}_j. \quad (3.18)$$

Dabei sind $\mathbf{u}_j(t) \in \mathbb{R}^3$ die Knotenverschiebungen aller n_u Knoten, $\delta \mathbf{u}_j(t) \in \mathbb{R}^3$ die virtuellen Knotenverschiebungen und $N_j(\mathbf{x})$ die Ansatzfunktionen ausgewertet am Knoten j . $\mathbf{x} \in \Omega$ ist die den Ort des Knotens beschreibende Ortskoordinate.

Die Ansatzfunktionen erfüllen die Anforderung, dass sie an allen Knotenpunkten eines Elements den Wert 0 besitzen und nur an genau einem Knotenpunkt den Wert 1. Im Einheitsselement, welches als Einheitsquader definiert wird, werden dafür häufig lineare Ansatzfunktionen der Form

$$N_j(\boldsymbol{\xi}) = \frac{1}{8}(1 + \xi_j \xi)(1 + \eta_j \eta)(1 + \zeta_j \zeta) \quad (3.19)$$

verwendet. Die Ansatzfunktionen sind zwar nicht auf lineare Zusammenhänge beschränkt, doch sollen diese an dieser Stelle zur Illustration ausreichen¹.

Die eigentliche Transformation der Koordinaten $\mathbf{x} \in \omega^e$ (bzw. $\mathbf{X} \in \Omega^e$) auf die Koordinaten $\xi \in \Omega_\square$ der Referenzkonfiguration² wird wie folgt durchgeführt

$$\mathbf{x} = \chi^e(\xi) = \mathbf{x}^h(\xi, t) \quad \leftrightarrow \quad \xi = \varphi^e(\mathbf{x}) \quad (3.20)$$

$$\mathbf{X} = \chi_R^e(\xi) = \mathbf{X}^h(\xi) \quad \leftrightarrow \quad \xi = \varphi_R^e(\mathbf{X}) \quad (3.21)$$

Entsprechend transformieren sich die Linienelemente gemäß

$$d\mathbf{x} = \mathbf{j}^e d\xi, \quad d\mathbf{X} = \mathbf{J}^e d\xi \quad (3.22)$$

mit den Jacobi-Matrizen

$$\mathbf{j}^e = \left[\frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \xi} \right] \quad \text{sowie} \quad \mathbf{J}^e = \left[\frac{\partial \mathbf{X}}{\partial \xi} \right]. \quad (3.23)$$

Mit Hilfe der Ansatzfunktionen (3.19) lässt sich schreiben

$$\mathbf{X}^h(\xi) = \sum_{j=1}^{n_n} N_j(\xi) \mathbf{X}_j^e \quad (3.24)$$

$$\mathbf{x}^h(\xi, t) = \sum_{j=1}^{n_n} N_j(\xi) \mathbf{x}_j^e(t). \quad (3.25)$$

Formulierung in Matrixnotation

Sortiert man die Verschiebungen $\mathbf{u}_j(t)$ in einen globalen Vektor $\mathbf{u}_a(t)$ aller Verschiebungen ein (und führt dies analog mit den virtuellen Verschiebungen $\delta \mathbf{u}_j$ aus), so werden die Verschiebungen innerhalb eines Elementes e durch die Ansatzfunktionen \mathbf{N}^e beschrieben. Allgemein können die Ansatzfunktionen in einem Element zu einer Matrix $\mathbf{N}_a(\mathbf{x})$ zusammengefasst werden, d.h. es gilt

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}, t) = \mathbf{N}_a(\mathbf{x}) \mathbf{u}_a(t) \stackrel{\text{in } e}{=} \mathbf{N}^e(\varphi^e(\mathbf{x})) \mathbf{u}^e \quad (3.26)$$

$$\delta \mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_a(\mathbf{x}) \delta \mathbf{u}_a \stackrel{\text{in } e}{=} \mathbf{N}^e(\varphi^e(\mathbf{x})) \delta \mathbf{u}^e. \quad (3.27)$$

Der Index a steht dafür, dass in dem entsprechenden Vektor \mathbf{u}_a alle Verschiebungsfreiheitsgrade enthalten sind.

¹Ansatzfunktionen höherer Ordnung werden z.B. in (Düster et al., 2002), (Netz et al., 2013) und (Netz, 2013) behandelt.

²Bei der Referenzkonfiguration handelt es sich nicht notwendigerweise um einen Zustand, den der Körper überhaupt einnimmt, vielmehr wird im Referenzelement Ω_\square die erforderliche Integration in Form einer Gauss-Quadratur durchgeführt. Dies ist z.B. in (Dhatt und Touzot, 1985) und (Schwarz und Köckler, 2004) beschrieben.

Zur weiteren Umsetzung werden alle Größen in bekannte und unbekannte Größen zerlegt. Die bekannten Größen werden dabei durch einen Strich über dem Symbol (z.B. $\bar{\mathbf{u}}(t)$) markiert während die unbekannten Größen durch ein Nichtvorhandensein zusätzlicher Symbolik zu erkennen sind (z.B. $\mathbf{u}(t)$). Für die Verschiebungen und ihre virtuellen Gegenstücke gilt daher

$$\mathbf{u}_a(t) = \begin{Bmatrix} \mathbf{u}(t) \\ \bar{\mathbf{u}}(t) \end{Bmatrix}, \quad \delta \mathbf{u}_a = \begin{Bmatrix} \delta \mathbf{u} \\ \delta \bar{\mathbf{u}} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \delta \mathbf{u} \\ \mathbf{0} \end{Bmatrix}. \quad (3.28)$$

In gleicher Weise kann die Matrix aller Ansatzfunktionen $\mathbf{N}_a(\mathbf{x})$ zerlegt werden

$$\mathbf{N}_a(\mathbf{x}) = [\mathbf{N}(\mathbf{x}) \quad \bar{\mathbf{N}}(\mathbf{x})]. \quad (3.29)$$

Damit lässt sich Gleichung (3.26) als

$$\mathbf{u}^h(\mathbf{x}, t) = \mathbf{N}_a(\mathbf{x}) \mathbf{u}_a(t) = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \mathbf{u}(t) + \bar{\mathbf{N}}(\mathbf{x}) \bar{\mathbf{u}}(t) \quad (3.30)$$

$$\delta \mathbf{u}^h(\mathbf{x}) = \mathbf{N}_a(\mathbf{x}) \delta \mathbf{u}_a = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \delta \mathbf{u} \quad (3.31)$$

schreiben. Um aus dem Verschiebungsvektor \mathbf{u} die einem bestimmten Element zugehörigen Verschiebungen herauszugreifen, wendet man formal sogenannte Koinzidenzmatrizen $\mathbf{Z}_a^e = [\mathbf{Z}^e \quad \bar{\mathbf{Z}}^e]$ an (vgl. z.B. (Hughes, 2000) oder (Hartmann, 2003)). Diese bestehen nur aus Nullen und Einsen und fungieren als eine Art Filter. Für die Verschiebungen gilt damit

$$\mathbf{u}^e = \mathbf{Z}_a^e \mathbf{u}_a = \mathbf{Z}^e \mathbf{u} + \bar{\mathbf{Z}}^e \bar{\mathbf{u}}. \quad (3.32)$$

Dies bleibt ein formales Vorgehen, welches zum Verständnis der Struktur der finiten Elemente sinnvoll ist. In der Praxis werden die Koinzidenzmatrizen nicht aufgebaut. Sie würden umfangreicheren Problemstellungen unnötigerweise enorm viel Speicherkapazität verbrauchen. Stattdessen wird das Herausfiltern der Elemente des Gesamtverschiebungsvektors mit Hilfe von Implementierungs- und Zuordnungsanweisungen durchgeführt, wie sie z.B. in (Hughes, 2000) zu finden sind. Dennoch helfen die Koinzidenzmatrizen dabei, eine kompakte und leicht verständliche Notation zu entwickeln (vgl. (Hartmann, 2005) oder (Hartmann und Hamkar, 2010)).

Schwache Form

Bei der Diskretisierung der schwachen Form (3.11) resultiert auf Elementebene eine sogenannte Verzerrungs-Verschiebungsmatrix \mathbf{B} , welche die Verschiebungen \mathbf{u} mit den Verzerrungen $\mathbf{E}(\mathbf{X}, t)$ verknüpft.

$$\mathbf{E}^h(\mathbf{X}, t) = \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{u}_a(t), \mathbf{X}) \mathbf{u}(t) + \bar{\tilde{\mathbf{B}}}(\mathbf{u}_a(t), \mathbf{X}) \bar{\mathbf{u}}(t) \quad (3.33)$$

$$\delta \mathbf{E}^h(\mathbf{X}, t) = \tilde{\mathbf{B}}(\mathbf{u}_a(t), \mathbf{X}) \delta \mathbf{u}(t) \quad (3.34)$$

Zur numerischen Umsetzung wird die Symmetrie des Spannungs- und Verzerrungstensors bewusst bei dem Übergang des Skalarprodukts ausgenutzt

$$\delta \mathbf{E} \cdot \tilde{\mathbf{T}} \rightarrow \delta \mathbf{E}^T \tilde{\mathbf{T}}. \quad (3.35)$$

Bei der Anordnung der Komponenten der Tensoren $\tilde{\mathbf{T}}$ und \mathbf{E} im entsprechenden Vektor \mathbf{E} bzw. $\tilde{\mathbf{T}}$, muss daher ein Faktor 2 in den Nichtdiagonalelementen berücksichtigt werden, d.h.

$$\mathbf{E}^h(\mathbf{X}, t) = \{E_{11}, E_{22}, E_{33}, 2E_{12}, 2E_{23}, 2E_{31}\}^T, \quad (3.36)$$

$$\tilde{\mathbf{T}}^h(\mathbf{X}, t) = \{\tilde{T}_{11}, \tilde{T}_{22}, \tilde{T}_{33}, \tilde{T}_{12}, \tilde{T}_{23}, \tilde{T}_{31}\}^T. \quad (3.37)$$

Zusammen mit den Koinzidenzmatrizen \mathbf{Z}_a^e und den Ansatzfunktionen im Element \mathbf{N}^e kann man die schwache Form der Impulsbilanz (3.11) schreiben als

$$\begin{aligned} \pi^h(\mathbf{u}, \mathbf{q}, \delta \mathbf{u}, t) = \delta \mathbf{u}^T \left\{ \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{Z}^{eT} \left\{ \int_{\Omega^e} \tilde{\mathbf{B}}^{eT}(\mathbf{u}^e(t), \mathbf{X}) \mathbf{h}^e(\mathbf{C}^e(\mathbf{X}, t), \mathbf{q}^e(\mathbf{X}, t)) d\Omega^e \right. \right. \\ \left. \left. - \underbrace{\int_{\omega^e} \mathbf{N}^{eT}(\mathbf{X}) \rho_R(\mathbf{X}) \mathbf{k}^e d\Omega^e + \int_{\Gamma^e} \mathbf{N}^{eT}(\mathbf{X}) \mathbf{t}^e(\mathbf{X}, t) d\Gamma^e}_{\bar{\mathbf{p}}^e(\mathbf{X}, t)} \right\} \right\} = 0. \end{aligned} \quad (3.38)$$

Dabei ist $\tilde{\mathbf{B}}^e(\mathbf{u}^e(t), \mathbf{X}) = [\tilde{\mathbf{B}}_1^e(\mathbf{u}^e(t), \mathbf{X}) \dots \tilde{\mathbf{B}}^e(\mathbf{u}^e(t), \mathbf{X})] \in \mathbb{R}^{6 \times 3n_u^e}$ die Verzerrungs-Verschiebungsmatrix. Da die virtuellen Verschiebungen nicht real sind, muss der Klammerausdruck in Gleichung (3.38) verschwinden und es bleibt das nichtlineare Gleichungssystem

$$\tilde{\mathbf{g}}(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t) = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{Z}^{eT} \int_{\Omega^e} \tilde{\mathbf{B}}^{eT}(\mathbf{u}^e(t), \mathbf{X}) \tilde{\mathbf{T}}^e(\mathbf{X}, t) d\Omega^e - \bar{\mathbf{p}}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{0} \quad (3.39)$$

zu lösen. Bezogen auf die Momentankonfiguration lautet das diskretisierte Prinzip der virtuellen Verschiebungen (vgl. z.B. (Hartmann, 2003))

$$\mathbf{g}(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t) = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{Z}^{eT} \int_{\omega^e} \mathbf{B}^{eT}(\mathbf{x}) \mathbf{S}^e(\mathbf{x}, t) d\omega^e - \bar{\mathbf{p}}(\mathbf{x}, t) = \mathbf{0}. \quad (3.40)$$

Der 2. Piola-Kirchhoff Tensor wird durch die Elastizitätsbeziehung

$$\tilde{\mathbf{T}}^e(\mathbf{X}, t) = \tilde{\mathbf{h}}^e(\mathbf{C}^e(\mathbf{X}, t), \mathbf{q}^e(\mathbf{X}, t)) \quad (3.41)$$

definiert und die gewichteten Cauchy-Spannungen sind gegeben durch

$$\mathbf{S}^e(\mathbf{x}, t) = \mathbf{F}_{23}^e \tilde{\mathbf{T}}^e, \quad (3.42)$$

was auf

$$\mathbf{g}(\mathbf{u}, \mathbf{q}, t) = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \int_{\Omega^e} \mathbf{B}^{eT}(\mathbf{X}) \mathbf{F}_{23}^e \tilde{\mathbf{T}}^e(\mathbf{X}, t) d\Omega^e - \bar{\mathbf{p}}(\mathbf{X}, t) = \mathbf{0} \quad (3.43)$$

führt. Die Verzerrungs-Verschiebungsmatrix \mathbf{B}^e besteht aus den Ableitungen der Ansatzfunktionen nach den räumlichen Koordinaten.

$$\mathbf{B}^e(\varphi^e(\mathbf{x})) = [\mathbf{B}_1^e \dots \mathbf{B}_{n_{en}}^e] \in \mathbb{R}^{6 \times 3n_u^e} \quad (3.44)$$

mit

$$\mathbf{B}_a^e(\varphi^e(\mathbf{x})) = \begin{bmatrix} n_{a,x}^e & 0 & 0 \\ 0 & n_{a,y}^e & 0 \\ 0 & 0 & n_{a,z}^e \\ n_{a,y}^e & n_{a,x}^e & 0 \\ 0 & n_{a,z}^e & n_{a,y}^e \\ n_{a,z}^e & 0 & n_{a,x}^e \end{bmatrix}, \quad a = 1, \dots, n_u^e. \quad (3.45)$$

Bei Gleichung (3.43) handelt es sich um ein System von nichtlinearen algebraischen Gleichungen, welches zusammen mit den Materialgleichungen gelöst werden muss. Das Integral aus dieser Gleichung wird dazu in einen normierten Referenzraum Ω_\square überführt und an den n_{GP} Gauss-Punkten mit den lokalen Koordinaten $\xi_l = \{\xi, \eta, \zeta\}_l^T$ eine Gauss-Integration (vergleiche (Dhatt und Touzot, 1985) oder (Schwarz et al., 1972)) mit den Wichtungsfaktoren w_l durchgeführt. Der Index l bezeichnet dabei die Nummer des Gauss-Punkts im Element. Es gilt

$$\int_{\Omega^e} \mathbf{B}^{eT}(\mathbf{x}) \mathbf{S}^e(\mathbf{X}, t) d\Omega^e = \int_{\Omega_\square} \tilde{\mathbf{B}}^{eT}(\xi) \mathbf{S}^e(\xi, t) \det \mathbf{j}^e(\xi) d\Omega_\square \quad (3.46)$$

$$\approx \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{l=1}^{n_{GP}} w_l \mathbf{B}^{eT}(\xi_l) \mathbf{S}^e(\xi_l, t) \det \mathbf{j}^e(\xi_l). \quad (3.47)$$

Die in Gleichung (3.41) auftretenden inneren Variablen werden ebenfalls an den Gauss-Punkten ausgewertet. In diskretisierter Form haben die inneren Variablen die Form

$$\dot{\mathbf{q}}^e(\xi_l, t) = \tilde{\mathbf{r}}^e(\mathbf{C}^e(\xi_l, t), \mathbf{q}^e(\xi_l, t)). \quad (3.48)$$

Diese Differentialgleichungen, welche an jedem Gauss-Punkt gelöst werden müssen, werden global in einem Vektor $\mathbf{q}(t) \in \mathbb{R}^{n_Q}$ zusammengefasst ($n_Q = n_e \times n_{GP} \times n_q$).

Die Assemblierung dieser für jedes Element gültigen Vektoren \mathbf{q}^e erfolgt ebenfalls über Koinzidenzmatrizen \mathbf{Z}_{ql}^e für die inneren Variablen

$$\mathbf{q}^e(\xi_l, t) = \mathbf{Z}_{\text{ql}}^e \mathbf{q}(t), \quad \mathbf{q}^e(\xi_l, t) \in \mathbb{R}^{n_q}. \quad (3.49)$$

Die Assemblierung des globalen Vektors \mathbf{q} erfolgt nach

$$\mathbf{q}(t) = \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{l=1}^{n_{\text{GP}}} \mathbf{Z}_{\text{ql}}^{eT} \mathbf{q}^e(\xi_l, t), \quad (3.50)$$

was aufgrund der Entkopplung der inneren Variablen und deren Evolutionsgleichungen von Gauss-Punkt zu Gauss-Punkt plausibel ist, vgl. (Hartmann, 2003).

Formal werden die Evolutionsgleichungen (3.48) an jedem Gauss-Punkt zu einem globalen Differentialgleichungssystem zusammengefasst.

$$\dot{\mathbf{q}}(t) - \mathbf{r}(t, \mathbf{u}(t), \mathbf{q}(t)) = \mathbf{0} \quad (3.51)$$

Zusammen mit Gleichung (3.43) ist so ein Algebro-Differentialgleichungssystem zu lösen. Die Lösung erfolgt mit Hilfe von numerischen Lösungsverfahren, die im folgenden Abschnitt 3.3 kurz erläutert werden.

3.3 Zeitintegration

Die numerische Lösung von Differentialgleichungen erster Ordnung ist wesentlicher Bestandteil der Finite-Elemente Methode. Zum besseren Verständnis und insbesondere zum Verständnis der Notation, werden an dieser Stelle die Grundlagen kurz vorgestellt.

Allgemein liegt ein Differentialgleichungssystem in impliziter Art vor, so dass

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{y}(t), \dot{\mathbf{y}}(t)) = \mathbf{0} \quad (3.52)$$

gilt. Dabei ist $\mathbf{y}(t)$ die interessierende Größe mit den Anfangsbedingungen $\mathbf{y}(t_0) = \mathbf{y}_0$. Sie soll im Zeitintervall $[t_0, t_N]$ gelöst werden. Dazu wird das Zeitintervall in $N \in \mathbb{N}$ Zeitpunkte $t_0 < t_1 < \dots < t_n < \dots < t_N$ unterteilt, wobei $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$ ($n \in \mathbb{N}$, $n \leq N - 1$) die Schrittweite zwischen dem Zeitpunkt t_n bis zum Zeitpunkt t_{n+1} bezeichnet. Ausgehend von der bekannten Lösung $\mathbf{y}(t_n)$ zum Zeitpunkt t_n ist die Lösung $\mathbf{y}(t_{n+1})$ gesucht. Im einfachsten Fall des impliziten Euler Verfahrens berechnet sich diese Lösung in Näherung zu

$$\mathbf{y}(t_{n+1}) \approx \mathbf{y}_{n+1} = \mathbf{y}(t_n) + \Delta t_n \mathbf{f}(t_{n+1}, \mathbf{y}_{n+1}) \quad (3.53)$$

Auf eine genaue Herleitung dieser Vorgehensweise soll an dieser Stelle nicht eingegangen werden, da es den Rahmen dieser Arbeit sprengen würde. Für die Grundlagen zur numerischen Lösung von Differentialgleichungen seien (Butcher, 2008) und (Hairer und Wanner, 1996) empfohlen. Das implizite Euler Verfahren ist ein Spezialfall der Klasse von Runge-Kutta Verfahren.

Diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren

In der Finiten-Elemente Methode liegt das grundlegende Gleichungssystem besonders in der Plastizitätstheorie in der speziellen Struktur eines DAE-Systems vor. Dabei sind gewöhnliche Differentialgleichungen mit algebraischen Nebenbedingungen gekoppelt. Für eine umfassendere Vertiefung von DAE-Verfahren sei an dieser Stelle auf (Brenan et al., 1996) sowie (Hairer und Wanner, 1996) verwiesen.

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{y}(t), \dot{\mathbf{y}}(t)) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{g}(t, \mathbf{u}(t), \mathbf{q}(t)) \\ \dot{\mathbf{q}}(t) - \mathbf{r}(t, \mathbf{u}(t), \mathbf{q}(t)) \end{array} \right\} = \mathbf{0}, \quad (3.54)$$

Diese Struktur muss bei der numerischen Lösung ausgenutzt werden. Dabei gilt:

$$\mathbf{y}(t) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}(t) \\ \mathbf{q}(t) \end{array} \right\}, \quad \text{mit} \quad \mathbf{y}_0 = \mathbf{y}(t_0) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}_0 \\ \mathbf{q}_0 \end{array} \right\}. \quad (3.55)$$

Um dieses DAE-System zu lösen, können sogenannte steif-genaue diagonal-implizite

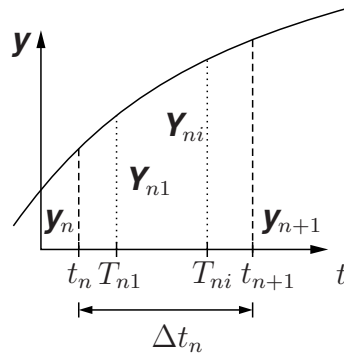


Abbildung 3.3: Zeitschritte und Stützstellen der Runge-Kutta Verfahren

Runge-Kutta Verfahren angewendet werden. Dies wird z.B. in (Ellsiepen und Hartmann, 2001), (Hartmann, 2002) oder (Bier und Hartmann, 2006) gezeigt. Im Unterschied zum impliziten Euler Verfahren werden zusätzlich zu der Schrittweite Δt_n noch s Stützstellen (bzw. Stufen) eingeführt und die Stufenwerte \mathbf{Y}_{ni} und die Stufenableitung $\dot{\mathbf{Y}}_{ni}$ berechnet. Für jeden Integrationsschritt gilt

$$\mathbf{Y}_{ni} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^i a_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj} \quad (3.56)$$

bzw.

$$\mathbf{Y}_{ni} = \mathbf{S}_{ni} + \Delta t_n a_{ii} \dot{\mathbf{Y}}_{ni}, \quad (3.57)$$

dabei stellt

$$\mathbf{S}_{ni} = \mathbf{y}_n + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{nj} \quad (3.58)$$

den Startwert dar. Ist dieser bekannt (was durch die Art des Lösungsverfahrens jederzeit gegeben ist), so gilt für die Stufenableitung $\dot{\mathbf{Y}}_{ni}$

$$\dot{\mathbf{Y}}_{ni} = \frac{\mathbf{Y}_{ni} - \mathbf{S}_{ni}}{\Delta t_n a_{ii}}. \quad (3.59)$$

Die Wichtungsfaktoren a_{ij} ergeben sich aus einer zweifach angewendeten Quadraturregel und unterscheiden sich je nach konkretem Runge-Kutta Verfahren. Sie lassen sich den sogenannten Butcher-Tableaus entnehmen. Darin sind die Faktoren nach ihrer Genauigkeit und Stabilität enthalten (Hairer und Wanner, 1996). Besonderer Wert wird an dieser Stelle auf die steif-genauen diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren (DIRK) gelegt, siehe auch (Ellsiepen und Hartmann, 2001). Da es sich dabei um steif-genaue Verfahren handelt, gilt $a_{sj} = b_j$. Daher stimmt der an der Stützstelle \mathbf{Y}_{ns} berechnete Wert mit dem des nächsten Zeitschritts \mathbf{y}_{n+1} überein.

Mit den Abkürzungen

$$\mathbf{y}_n = \begin{Bmatrix} \mathbf{u}_n \\ \mathbf{q}_n \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{Y}_{ni} = \begin{Bmatrix} \mathbf{U}_{ni} \\ \mathbf{Q}_{ni} \end{Bmatrix}, \quad \mathbf{S}_{ni} = \begin{Bmatrix} \mathbf{S}_{ni}^u \\ \mathbf{S}_{ni}^q \end{Bmatrix} \quad (3.60)$$

gilt an jeder Stützstelle i für das Gleichungssystem (3.54)

$$\mathbf{0} = \mathbf{F}(T_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}, \dot{\mathbf{Y}}_{ni}) = \mathbf{F}\left(T_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}, \frac{\mathbf{Y}_{ni} - \mathbf{S}_{ni}}{\Delta t_n a_{ii}}\right) \equiv \mathbf{R}_{ni}(\mathbf{Y}_{ni}). \quad (3.61)$$

Diagonal-implizite Runge-Kutta Verfahren transformieren die s nichtlinearen gekoppelten Gleichungssysteme in nacheinander zu lösende s nichtlineare Gleichungssysteme, es findet eine Entkopplung statt. Angewendet auf das DAE-System (3.54) gilt mit

$$\mathbf{G}_{ni}(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) = \mathbf{g}(T_{ni}, \mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \quad (3.62)$$

$$\mathbf{L}_{ni}(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) = \frac{\mathbf{Q}_{ni} - \mathbf{S}_{ni}^q}{\Delta t_n a_{ii}} - \mathbf{r}(T_{ni}, \mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}), \quad (3.63)$$

für das Gleichungssystem

$$\mathbf{R}_{ni}(\mathbf{Y}_{ni}) = \begin{Bmatrix} \mathbf{G}_{ni}(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \\ \mathbf{L}_{ni}(\mathbf{U}_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \end{Bmatrix} = \mathbf{0} \quad (3.64)$$

an jeder Stufe i im Zeitintervall $[t_n, t_{n+1}]$.

3.4 Mehrebenen-Newton Verfahren (MLNA)

In der Methode der finiten Elemente wird als Lösungsstrategie zur iterativen Lösung des DAE-Systems (3.54) das Mehrebenen-Newton Verfahren genutzt (MLNA, von engl. "Multi-Level Newton Algorithm"), welches bei der Berechnung komplexer elektrischer Netzwerke angewendet wird, siehe (Rabbat et al., 1979) oder (Hoyer und Schmidt, 1984).

Das MLNA erhält seinen Namen von der Tatsache, dass es in verschiedene Ebenen aufgeteilt wird, die ineinander verschachtelt behandelt werden. Im Kontext der Finite-Elemente-Berechnung handelt es sich um eine globale und eine lokale Ebene. Auf der globalen Ebene wird die Gleichgewichtsbedingung ausgewertet, während lokal auf der Gauss-Punktebene die inneren Variablen iterativ berechnet werden.

Das zu lösende Gleichungssystem hat die Struktur

$$\mathbf{G}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}) = \mathbf{0} \quad (3.65)$$

$$\mathbf{L}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}) = \mathbf{0}. \quad (3.66)$$

Um die Übersichtlichkeit zu erhöhen wurde dabei der Index ni weggelassen. Eine Idee des MLNA ist der Satz über implizite Funktionen, welcher in der Nähe der Lösung einer hinreichend stetigen Funktion $\mathbf{L}(\mathbf{U}, \mathbf{Q})$ eine Funktion $\mathbf{Q}(\mathbf{U})$ garantiert. Damit lässt sich der algebraische Anteil schreiben als

$$\mathbf{G}(\mathbf{U}, \mathbf{Q}(\mathbf{U})) = \mathbf{0}. \quad (3.67)$$

Um iterativ auf die Verschiebung \mathbf{U} schließen zu können, wendet man ein klassisches Newton-Raphson Verfahren an. Dafür gilt in der m -ten Iteration

$$\left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} \right]^{(m)} \Delta \mathbf{U} = -\mathbf{G}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m)}). \quad (3.68)$$

Die Ableitungen $\partial \mathbf{G} / \partial \mathbf{U}$ und $\partial \mathbf{G} / \partial \mathbf{Q}$ können explizit berechnet werden und sind damit bekannt. Allerdings ist die Ableitung $d\mathbf{Q} / d\mathbf{U}$ der aktuellen Iteration noch unbekannt und muss in der lokalen Ebene bestimmt werden. Die Existenz der Funktion $\mathbf{Q}(\mathbf{U})$ wird durch den Satz über implizite Funktionen zwar ausgewertet, sie selbst bleibt allerdings unbekannt. Zu dieser Bestimmung wird Gleichung (3.66) für vorgegebene Knotenverschiebungen $\mathbf{U}^{(m)}$ lokal ausgewertet

$$\mathbf{L}(\mathbf{U}^{(m)}, \mathbf{Q}^{(m+1)}) = \mathbf{0} \quad \rightsquigarrow \mathbf{Q}^{(m+1)}. \quad (3.69)$$

Das totale Differential

$$\frac{d\mathbf{L}}{d\mathbf{U}} = \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} = \mathbf{0} \quad (3.70)$$

führt zu einem Gleichungssystem mit mehreren rechten Seiten für die Bestimmung von $d\mathbf{Q}/d\mathbf{U}$ in der Form

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} = -\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}}. \quad (3.71)$$

Die unbekannten inneren Variablen \mathbf{Q} können so z.B. mit einem einfachen Newton Raphson Verfahren bestimmt werden. Diese Vorgehensweise ist gerechtfertigt, weil die inneren Variablen von Gauss-Punkt zu Gauss-Punkt entkoppelt vorliegen.

Tabelle 3.2: Mehrebenen-Newton Verfahren zum Zeitpunkt T_{ni}

gegeben: $\mathbf{U}_{ni}^{(0)} = \mathbf{U}_{ni}$, $\mathbf{Q}_{ni}^{(0)} = \mathbf{Q}_{ni}$, Δt_{ni} , T_{ni}	
wiederhole, $m = 0, \dots$	
<i>Lokale Ebene</i>	(gegeben: $\mathbf{U}_{ni}^{(m)}$, Argumentvektor $\mathbf{z} \equiv (\mathbf{U}_{ni}^{(m)}, \mathbf{Q}_{ni}^{(m+1)})$)
Lokaler Integrationsschritt	
$\mathbf{L}(\mathbf{U}_{ni}^{(m)}, \mathbf{Q}_{ni}^{(m+1)}) = \mathbf{0} \quad \rightsquigarrow \mathbf{Q}_{ni}^{(m+1)}$	
konsistente Linearisierung	
$\left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \right]_{\mathbf{z}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} = -\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}} \Big _{\mathbf{z}} \quad \rightsquigarrow \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} \Big _{\mathbf{z}}$	
<i>Globale Ebene</i>	
Lösung des linearen Gleichungssystems	
$\left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}} \Big _{\mathbf{z}} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \Big _{\mathbf{z}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} \Big _{\mathbf{z}} \right] \Delta \mathbf{U}_{ni} = -\mathbf{G}(\mathbf{z}) \quad \rightsquigarrow \Delta \mathbf{U}_{ni}$	
Update der globalen Variablen	
$\mathbf{U}_{ni}^{(m+1)} \leftarrow \mathbf{U}_{ni}^{(m)} + \Delta \mathbf{U}_{ni} \quad \rightsquigarrow \mathbf{U}_{ni}^{(m+1)}$	
bis	Konvergenzkriterium erfüllt

Global wird der Zuwachs $\Delta \mathbf{U}$ durch das lineare Gleichungssystem (3.68) bestimmt. Damit berechnen sich die Verschiebungen im nächsten Schritt gemäß

$$\mathbf{U}^{(m)} = \mathbf{U}^{(m)} + \Delta \mathbf{U}. \quad (3.72)$$

Zusammengefasst hat das Mehrebenen-Newton Verfahren die in Tabelle 3.2 dargestellte Form.

4 Statistische Grundlagen

Ziel dieses Abschnitts ist es, eine Systematik aufzuzeigen, mit deren Hilfe man Ergebnisse von Finite-Elemente Simulationen hinsichtlich ihres Vertrauens bzw. ihrer Unsicherheiten beschreiben kann. Dazu werden einige Formalitäten der Statistik wiederholt und auf Charakterisierung von Unsicherheiten eingegangen.

Die Statistik beschäftigt sich damit, bestimmte Vorgänge oder Zusammenhänge darzustellen, die aufgrund einer großen Anzahl an auszuwertenden Daten nicht für deterministische Konzepte nutzbar sind. Sie analysiert Informationen in Form von (gemessenen) Daten, fasst diese Daten zusammen und organisiert diese mit dem Ziel, aus der Verteilung der Daten Rückschlüsse auf die Eigenschaften der zugrundeliegenden Prozesse zu machen. Die nötigen Grundlagen zur Wahrscheinlichkeitsrechnung werden an dieser Stelle vorausgesetzt, und es wird nur sehr kurz auf die wichtigsten Konzepte eingegangen. Für weitere und tiefergehendere Informationen sei (Hübner, 2009) und (Bosch, 1999) als Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie genannt. Für intensivere Beschäftigung mit der Statistik werden (Bosch, 2000) und (Sachs und Hedderich, 2012) empfohlen. Im Kontext der Sensitivitäts- und Unsicherheitsanalyse liefert z.B. Cacuci (2003) einen umfangreichen Überblick.

In dieser Arbeit liegt der Fokus auf der empirischen (bzw. beschreibenden) Statistik. Daher werden die stochastisch motivierten Definitionen der Größen an dieser Stelle nicht wiederholt. Für einen genaueren Überblick werden u.a. (Bosch, 1999), (Sachs und Hedderich, 2012), (Kohn, 2005) oder (Lehn und Wegmann, 2000) empfohlen.

Der Beobachtungswert $\kappa^{(i)}$ stellt einen einzelnen Messwert dar, welchen man bei n_b vorhandenen Werten zu einem Vektor $\boldsymbol{\kappa}^T = \{\kappa^{(1)}, \dots, \kappa^{(n_b)}\}^1$ zusammenfassen kann. Als interessierende Werte für die Charakterisierung der zu untersuchenden Größen wird besonderer Wert auf den Mittelwert $\bar{\kappa}$, die Standardabweichung $s_{\hat{\kappa}}$, die Varianz $s_{\hat{\kappa}}^2$ sowie die Kovarianz $\check{c}_{\kappa^{(i)}\kappa^{(j)}}$ gelegt. Die einzelnen Kovarianzen $\check{c}_{\kappa^{(i)}\kappa^{(j)}}$ können in der Kovarianzmatrix $\check{\mathbf{C}}_{\hat{\kappa}}$ zusammengefasst werden. Als Korrelationskoeffizient wird $\rho_{\kappa\tau}$ gewählt und $\hat{\mathbf{R}}$ bezeichnet die Korrelationsmatrix.

Zwei wichtige Aussagen der Wahrscheinlichkeitsrechnung sind von essentieller Bedeutung und begründen die in dieser Arbeit durchgeführte Vorgehensweise. Es handelt sich dabei um den *zentralen Grenzwertsatz* und das *Gesetz der großen Zahlen* (siehe Abschnitt 4.5.3 bzw. Abschnitt 4.1.2).

¹Diese Werte sind zunächst einmal abstrakt und unterliegen keiner speziellen Bedeutung. Im Zuge dieser Arbeit werden die Materialparameter konstitutiver Modelle untersucht und daher die Notation mit Hilfe von κ formuliert.

Mit Hilfe der Statistik motiviert sich der Begriff der Fehlerfortpflanzung. Deren Ziel ist es, die in jeder Art von Messungen auftretenden Messfehler bzw. Messunsicherheiten zu nutzen, um deren Auswirkungen auf mathematische Modelle zu berücksichtigen. Diese besonders in der Physik etablierte Methode wird in einer Vielzahl von Literatur behandelt. Einen Überblick darüber geben z.B. die Bücher (Taylor, 1997) oder (Bevington und Robinson, 2003). Im Folgenden sollen einige Grundbegriffe geklärt werden, um die Fehlerfortpflanzung im Sinne der Finiten-Elemente anwenden zu können. Ziel dabei ist es, bestimmte Maße zu entwickeln, die helfen können schon während des Prozesses der Materialmodellentwicklung und der zugehörigen Identifikation der zugehörigen Parameter die Qualität der Parameter sowie des Modells abzuschätzen und zu quantifizieren und diese Erkenntnisse in der Modellierung einsetzen zu können.

4.1 Grundlagen der Wahrscheinlichkeitsrechnung

Da im Folgenden zum Teil Begriffe der Wahrscheinlichkeitstheorie Verwendung finden, sollen diese an dieser Stelle kurz erläutert werden. Eine umfassende Erklärung wird dabei nicht durchgeführt, dies ist durch verschiedene Bücher zur Wahrscheinlichkeitstheorie umfassend ausgeführt.

4.1.1 Zufall und Wahrscheinlichkeit

Der Begriff Zufall beschreibt die Situation, in der man für das Eintreffen eines Ereignisses keine vollständig sichere Aussage treffen kann. Bei allgemeinen makroskopischen Vorgängen liegt der Grund dafür meist darin, dass nicht alle nötigen Informationen vorliegen oder es aufgrund der Menge an Informationen nicht möglich ist, mit ihnen das genaue Ergebnis vorherzusagen.

Zufallsexperimente

Zufallsexperimente sind Experimente, bei deren Durchführung ein im Vorfeld nicht vorhersagbares Ergebnis auftritt. Ein (zufälliges) Ereignis A ist dabei ein Versuchsausgang, der bei der Durchführung eines Zufallsexperimentes eintreten kann. Das Resultat eines Zufallsexperiments kann durch Zufallsvariablen beschrieben werden.

Wahrscheinlichkeit

Die Wahrscheinlichkeit weist jedem Ereignis eines Zufallsexperiments einen Wert zwischen 0 und 1 zu unter der Voraussetzung, dass sich die Wahrscheinlichkeiten aller möglichen Ereignisse zum Wert 1 aufsummieren. Die Wahrscheinlichkeit eines Ereignisses A wird mit $P(A)$ bezeichnet. Jedem möglichen Ausgang eines Zufallsexperiments kann man eine Zufallsvariable K zuordnen, deren Realisierung meist mit κ bezeichnet wird.

Die Grundgesamtheit ist dabei die Menge aller möglichen Ausgänge des Experiments, d.h. aller Zufallsvariablen. Ist die Wahrscheinlichkeit für das Auftreten einer Realisierung κ_i von K bekannt durch p_i , dann gilt

$$P(K = \kappa_i) = p_i. \quad (4.1)$$

4.1.2 Zusammenhang zwischen empirischer Statistik und Stochastik

Da in dieser Arbeit die praktische Anwendung der Statistik im Vordergrund steht, wird den stochastischen Grundlagen an dieser Stelle nur sekundäre Beachtung geschenkt. Daher ist eine kurze Einführung und Erklärung notwendig.

Der grundlegende Unterschied zwischen empirischer Statistik und der Wahrscheinlichkeitsrechnung ist, dass die Statistik stets durch reale Daten motiviert wird, während die Stochastik mehr Wert auf die Ergründung der theoretischen Hintergründe legt. Das Gesetz der Großen Zahlen bildet dabei einen Teil des Übergangs zwischen beiden Gebieten. So werden ähnlich definierte Größen aus der Statistik für eine große Anzahl an Messungen gegen die nach der Stochastik zu erwartenden Größen konvergieren. So wird der später noch zu definierende Mittelwert $\bar{\kappa}$ einer Beobachtungsgröße κ gegen den Erwartungswert $\mu(\kappa)$ dieser Größe streben. Ebenso wird die empirische Varianz $s_{\bar{\kappa}}$ gegen die Varianz σ^2 dieser Größe konvergieren. Für eine große Anzahl an Messungen gilt daher

$$\bar{\kappa} \approx \mu, \quad (4.2)$$

$$s_{\bar{\kappa}} \approx \sigma. \quad (4.3)$$

Der Begriff der Wahrscheinlichkeitsverteilung ist in der Stochastik das Äquivalent zur Häufigkeitsverteilung in der Statistik. Dabei sind die meisten in der Stochastik definierten Wahrscheinlichkeitsverteilungen stetige Funktionen, was für Häufigkeitsverteilungen nicht gelten kann. Daher werden zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeitsverteilungen die in der Stochastik üblichen Bezeichnungen μ und σ^2 gewählt.

Gesetz der großen Zahlen

Das Gesetz der großen Zahlen als mathematischer Satz besagt, dass die relative Häufigkeit eines Zufallsereignisses für eine große Anzahl an Realisierungen dieses Zufallsereignisses gegen die Wahrscheinlichkeit für dessen Eintreten strebt. Für eine Folge von Zufallsvariablen K_1, K_2, \dots, K_n gilt demnach

$$P \left(\limsup_{n_b \rightarrow \infty} \frac{1}{n_b} \sum_{i=1}^{n_b} (K_i - E(K_i)) = 0 \right) = 1. \quad (4.4)$$

Diese Aussage ist gültig, wenn jede Zufallsvariable K_i einen endlichen Erwartungswert $E(K_i)$ besitzt. Zusätzlich müssen alle Zufallsvariablen voneinander unabhängig sein und derselben Verteilung folgen.

Diese Annahmen sind in der praktischen Nutzung in vielen Fällen gegeben. Die wichtige Kernaussage des Gesetzes der großen Zahlen besteht in dem Zusammenhang zwischen beschreibender Statistik und der Wahrscheinlichkeitsrechnung. Der Mittelwert $\bar{\kappa}$ einer gemessenen Größe $\kappa^T = \{\kappa^{(1)}, \dots, \kappa^{(n_b)}\}$ strebt gegen ihren wahren Erwartungswert $\mu(K_i)$, d.h.

$$\lim_{n_b \rightarrow \infty} \bar{\kappa} = \mu_K. \quad (4.5)$$

In Abbildung 4.1 ist der empirische Mittelwert des Würfelwurfs eines 6-seitigen Würfels über der Anzahl n_b der Würfe dargestellt. Der während der ersten Würfe stark schwankende Mittelwert stabilisiert sich für größer werdende n gegen den Erwartungswert 3,5.

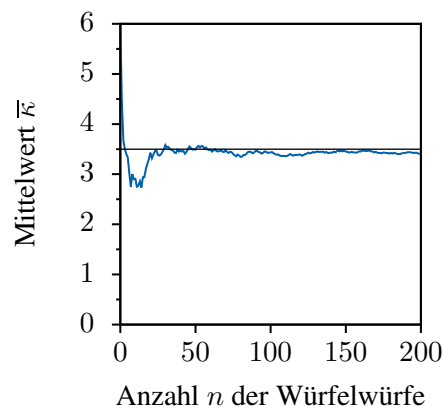


Abbildung 4.1: Verlauf des Mittelwerts $\bar{\kappa}$ beim Werfen eines 6-seitigen Würfels

4.2 Stichprobe

Eine Stichprobe ist eine Menge von Werten, die nach bestimmten Merkmalen aus einer Grundgesamtheit ausgewählt wurden. Sie weist eine bestimmte Verteilung auf, für deren Beschreibung man weiter Maße nutzen kann. Betrachtet man einen Vektor von Materialparametern $\kappa^T = \{\kappa_1, \dots, \kappa_{n_\kappa}\}$ und geht nun davon aus, dass man jeden Parameter mehrfach durch eine Messung bestimmen kann, so wird folgende Notation verwendet. Die Parameter κ_i , $i = 1, \dots, n_\kappa$ werden durch n_b wiederholte Messungen bestimmt. Dabei wird die j -te Messung mit $\kappa_i^{(j)}$ bezeichnet. Fasst man diese n_b Messungen oder

Beobachtungswerte zu einem neuen Vektor zusammen, so handelt es sich bei dem Vektor

$$\hat{\kappa}_i = \left\{ \kappa_i^{(1)}, \kappa_i^{(2)}, \dots, \kappa_i^{(n_b)} \right\} \quad (4.6)$$

um eine Stichprobe. Diese ist ein essentieller Begriff der Statistik, da es in den meisten Fällen nicht möglich ist, die Grundgesamtheit (d.h. alle potentiell messbaren Werte) zu untersuchen.

Die Art und Weise der Auswahl der zur Stichprobe gehörenden Werte ist maßgebend dafür, ob die Stichprobe repräsentativ ist oder nicht. Um zu gewährleisten, dass eine Stichprobe die Grundgesamtheit repräsentiert, müssen die Werte der Stichprobe zufällig und frei von subjektiven Kriterien sein. So ist z.B. die Auswahl jedes 10ten Messwerts zufällig, aber nicht nur die Auswahl aller Werte, die z.B. größer als eine Grenze sind.

Die verschiedenen Parameter und Messungen können in einer Matrix angeordnet werden, d.h.

$$\mathbf{K} = [\hat{\kappa}_1, \dots, \hat{\kappa}_{n_\kappa}]^T = \begin{bmatrix} \kappa_1^{(1)} & \dots & \kappa_1^{(n_b)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \kappa_{n_\kappa}^{(1)} & \dots & \kappa_{n_\kappa}^{(n_b)} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{n_\kappa \times n_b}. \quad (4.7)$$

Für den Fall nur eines betrachteten Parameters wird der Index zur besseren Lesbarkeit weggelassen, d.h. Gleichung (4.6) wird zu

$$\hat{\kappa} = \left\{ \kappa^{(1)}, \kappa^{(2)}, \dots, \kappa^{(n_b)} \right\} \quad \text{für } n_\kappa = 1 \text{ oder } i \text{ beliebig.} \quad (4.8)$$

4.3 Lage- und Streuungsmaße zur Charakterisierung von Stichproben

Stichproben werden mit Hilfe von bestimmten verschiedensten Maßzahlen charakterisiert. Diese erlauben eine grobe Einordnung und Interpretation der zugrundeliegenden Daten. Da in dieser Arbeit hauptsächlich der Mittelwert sowie die Varianz von Bedeutung sind, wird auf diese in diesem Abschnitt näher eingegangen.

4.3.1 Mittelwert - arithmetisches Mittel

Der Mittelwert $\bar{\kappa}$ wird häufig dazu herangezogen, das Zentrum einer Verteilung mit Hilfe eines einzigen skalaren Wertes anzugeben. Zusammen mit einem Streuungsmaß ist, ist man im Besitz einer groben Charakterisierung der zugrundeliegenden Verteilung.

Der empirische Mittelwert einer Stichprobe $\hat{\kappa} = \left\{ \kappa^{(1)}, \dots, \kappa^{(n_b)} \right\}$ ist definiert durch

$$\bar{\kappa} = \frac{1}{n_b} \sum_{i=1}^{n_b} \kappa^{(i)} \quad (4.9)$$

Im alltäglichen Sprachgebrauch wird der Mittelwert auch mit Durchschnitt bezeichnet. Die Summe der quadratischen Abweichung aller Messdaten von $\bar{\kappa}$ ist kleiner als die Summe der quadratischen Abweichung zu jedem anderen Wert $\kappa^{(i)} \neq \bar{\kappa}$. Es lässt sich schlussfolgern, dass

$$\sum_{i=1}^{n_b} (\kappa^{(i)} - \bar{\kappa}) = 0 \quad (4.10)$$

gilt. Neben dem arithmetischen Mittel existieren noch andere Möglichkeiten, so z.B. das geometrische Mittel oder das harmonische Mittel. Alle haben je nach Problemstellung ihre Daseinsberechtigung, spielen aber im Zuge dieser Arbeit nur eine untergeordnete Rolle und werden daher nicht explizit erläutert.

Für die allgemeine Darstellung bei mehreren Parametern wird der Mittelwert

$$\bar{\kappa} = \{\bar{\kappa}_1, \dots, \bar{\kappa}_{n_\kappa}\}^T \quad (4.11)$$

definiert, was mit der Definition eines Vektors voller Einsen

$$\mathbf{1}_{n_b \times 1} = \{1, 1, 1, \dots, 1\}^T \in \mathbb{R}^{n_b} \quad (4.12)$$

formuliert werden kann mit:

$$\bar{\kappa} = \frac{1}{n_b} \mathbf{K} \mathbf{1}_{n_b \times 1}. \quad (4.13)$$

Neben dem Mittelwert existieren weitere Lagemaße (z.B. Median, harmonischer Mittelwert, geometrischer Mittelwert, usw.), die je nach Datensituation und Skalenniveau unterschiedlich gut geeignet sind, Beobachtungsdaten zu charakterisieren. Da diese in der vorliegenden Arbeit nur eine untergeordnete Rolle spielen, wird an dieser Stelle die Lektüre von (Bosch, 2000), (Hübner, 2009) oder (Sachs und Hedderich, 2012) empfohlen.

Das Zentrum einer Verteilung kann durch die Lagemaße wie z.B. den Mittelwert beschrieben werden. Zur gesamten Charakterisierung ist dazu noch die Angabe der Variabilität der Verteilung wichtig. Diese wird durch die Streuungsparameter wie die Standardabweichung oder die Varianz beschrieben.

4.3.2 Varianz und Standardabweichung

Die Variabilität einer Stichprobe $\hat{\kappa}$ kann mit Hilfe der empirischen Varianz $s_{\hat{\kappa}}^2$ charakterisiert werden

$$s_{\hat{\kappa}}^2 = \frac{1}{n_b - 1} \sum_{i=1}^{n_b} (\kappa^{(i)} - \bar{\kappa})^2 \quad (4.14)$$

Diese ist für hinreichend große n_b eine gute Approximation der Varianz σ^2 . In der Literatur findet man häufig die Unterscheidung zwischen der korrigierten Stichprobenvarianz $s_{\bar{\kappa}}^2 = (\sum_{i=1}^{n_b} (\kappa^{(i)} - \bar{\kappa})^2) / (n_b - 1)$ und der unkorrigierten Stichprobenvarianz $s_{\hat{\kappa}}^2 = (\sum_{i=1}^{n_b} (\kappa^{(i)} - \bar{\kappa})^2) / n_b$. Der Unterschied zwischen beiden liegt in der Fragestellung begründet. Ist man an der Varianz der Stichprobe interessiert, so nutzt man die unkorrigierte Stichprobenvarianz, möchte man aber auf die Varianz σ der Grundgesamtheit schließen, so ist die korrigierte Stichprobenvarianz zu verwenden, siehe (Kohn, 2005). Da sich beide Formulierungen für große n_b einander annähern wird in dieser Arbeit nicht weiter darauf eingegangen und die Definition (4.14) genutzt. Eine ausführliche Erläuterung dazu findet sich in (Sachs und Hedderich, 2012).

Die empirische Standardabweichung $s_{\hat{\kappa}}$ als Wurzel der Varianz $s_{\hat{\kappa}}^2$ gibt an, wie stark die gemessenen Werte κ um ihren Mittelwert $\bar{\kappa}$ herum streuen. Zur Veranschaulichung sind die Häufigkeitsverteilungen von verschiedenen Größen in Abbildung 4.2 dargestellt.

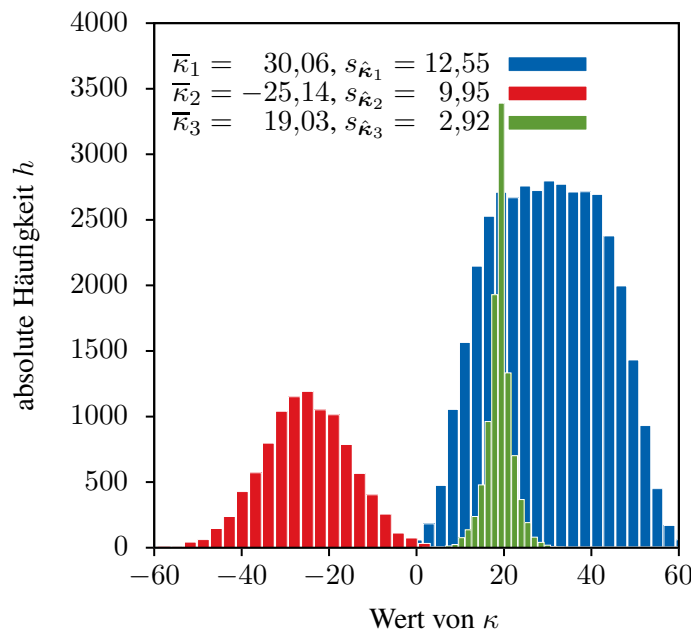


Abbildung 4.2: Empirische Verteilungen mit verschiedenen Mittelwerten und Standardabweichungen

In dieser Arbeit wird angenommen, dass jede gewählte Stichprobe repräsentativ ist und man damit auf die Grundgesamtheit schließen kann. Damit gilt grundsätzlich die

²Die Stichprobenvarianz $s_{\hat{\kappa}}^2$ ist eine Schätzung der im Allgemeinen unbekannten Varianz σ aus einer Reihe von endlichen Beobachtungswerten

Näherung

$$s_{\kappa} \approx \sigma_{\kappa} \quad (4.15)$$

zwischen der empirischen Standardabweichung s und der Standardabweichung der Grundgesamtheit σ .

4.3.3 Kovarianz

Den linearen Zusammenhang zwischen zwei Parametern $\hat{\kappa}_i^T = \{\kappa_i^{(1)}, \dots, \kappa_i^{(n_b)}\}$ und $\hat{\kappa}_j^T = \{\kappa_j^{(1)}, \dots, \kappa_j^{(n_b)}\}$ kann man mit Hilfe der Kovarianz beschreiben, welche eine Verallgemeinerung der Varianz darstellt. Beide Beobachtungsreihen besitzen dabei die gleiche Anzahl n_b an Werten. Die Kovarianz ist definiert als

$$\check{\kappa}_{\hat{\kappa}_i \hat{\kappa}_j} = \frac{1}{n_b - 1} \sum_{l=1}^{n_b} (\kappa_i^{(l)} - \bar{\kappa}_i)(\kappa_j^{(l)} - \bar{\kappa}_j). \quad (4.16)$$

Mit Blick auf Gleichung (4.14) wird deutlich, dass

$$\check{\kappa}_{\hat{\kappa}_i \hat{\kappa}_i} = s_{\hat{\kappa}_i}^2 \quad (4.17)$$

gilt. Anschaulich steckt dahinter die Idee, die Streuung von Messwertpaaren $(\kappa_i^{(k)}, \kappa_j^{(l)})$ durch die Abweichung von ihren Mittelwerten anzugeben. Dies ist in Abbildung 4.3 skizziert. Jedes Paar $(\kappa_i^{(k)}, \kappa_j^{(l)})$ trägt zur gesamten Kovarianz bei. Besteht zwischen κ_i

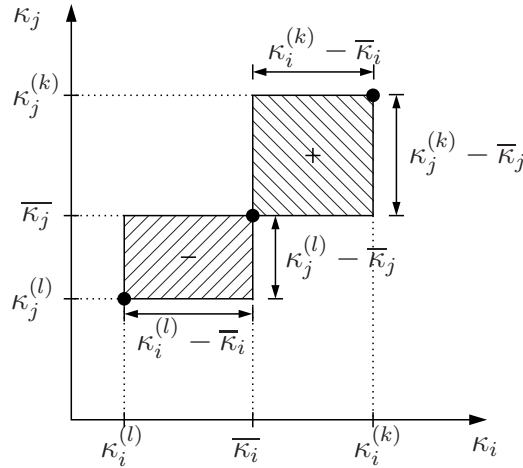


Abbildung 4.3: Anschauliche Bedeutung der Kovarianz

und κ_j ein linearer Zusammenhang, d.h. hohe Werte von κ_i treten meist zusammen mit hohen Werten von κ_j auf, so ist die resultierende Kovarianz positiv. Sie wird negativ, wenn hohe Werte von κ_i stets mit niedrigen Werten von κ_j einhergehen. Ohne einen linearen Zusammenhang zwischen beiden Variablen wird die Kovarianz Werte nahe Null annehmen.

Kovarianzmatrix

Die Kovarianzmatrix verallgemeinert diese Vorgehensweise auf mehrdimensionale Problemstellungen. Zur Untersuchung der Kovarianz von n_{κ} Größen $\hat{\kappa}_1, \dots, \hat{\kappa}_{n_{\kappa}}$, wobei für jeden i -ten Beobachtungsvektor

$$\hat{\kappa}_i = \left\{ \kappa_i^{(1)}, \dots, \kappa_i^{(n_b)} \right\}, \quad \text{für } i = 1, \dots, n_{\kappa}, \quad (4.18)$$

gilt. Die wechselseitigen Kovarianzen sind entsprechend Gleichung (4.16) gegeben. Dies sind die Komponenten der Kovarianzmatrix aller $\hat{\kappa}_i$. Durch Umsortieren der Summe in Gleichung (4.16) erhält man

$$\check{c}_{\hat{\kappa}_i \hat{\kappa}_j} = \frac{1}{n_b - 1} \left(\sum_{l=1}^{n_b} \kappa_i^{(l)} \kappa_j^{(l)} \right) - \frac{n_b}{n_b - 1} \bar{\kappa}_i \bar{\kappa}_j. \quad (4.19)$$

Die Summe $\sum_{l=1}^{n_b} \kappa_i^{(l)} \kappa_j^{(l)}$ ist identisch mit dem Skalarprodukt $\hat{\kappa}_i^T \hat{\kappa}_j$. Fasst man die einzelnen Beobachtungsvektoren in der Matrix \mathbf{K} aus Gleichung (4.7) zusammen und definiert einen Vektor $\hat{\kappa}$ (4.11), der die Mittelwerte

$$\bar{\kappa}_i = \frac{1}{n_b} \sum_{j=1}^{n_b} \kappa_i^{(j)} \quad (4.20)$$

der einzelnen Beobachtungsvektoren $\hat{\kappa}_i$ enthält, so kann man für die gesamte Kovarianzmatrix

$$\check{\mathbf{C}}_{\hat{\kappa}} = \frac{1}{n_b - 1} \left[\mathbf{K} \mathbf{K}^T - n_b \bar{\kappa} \bar{\kappa}^T \right] \in \mathbb{R}^{n_{\kappa} \times n_{\kappa}} \quad (4.21)$$

schreiben. Die Kovarianzmatrix besitzt die Struktur

$$\check{\mathbf{C}}_{\hat{\kappa}} = \begin{bmatrix} \check{c}_{\kappa_1 \kappa_1} & \dots & \check{c}_{\kappa_1 \kappa_{n_{\kappa}}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \check{c}_{\kappa_{n_{\kappa}} \kappa_1} & \dots & \check{c}_{\kappa_{n_{\kappa}} \kappa_{n_{\kappa}}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} s_{\kappa_1}^2 & \dots & \check{c}_{\kappa_1 \kappa_{n_{\kappa}}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \check{c}_{\kappa_{n_{\kappa}} \kappa_1} & \dots & s_{\kappa_{n_{\kappa}}}^2 \end{bmatrix}. \quad (4.22)$$

Auf der Hauptdiagonalen stehen die Varianzen der untersuchten Größen selbst. Die Nebendiagonalterme enthalten die wechselseitigen Kovarianzen und enthalten damit Informationen über die linearen Abhängigkeiten der Beobachtungsgrößen untereinander.

4.3.4 Korrelation

Die Kovarianz gibt einen Überblick über den linearen Zusammenhang³ zwischen zwei Größen. Allerdings ist sie nicht normiert und erlaubt daher nur in wenigen Fällen eine

³Man sollte stets vermeiden, eine Korrelation mit Kausalität zu verwechseln. Nur weil zwei Werte statistisch miteinander korrelieren, folgt daraus nicht zwingend ein kausaler Zusammenhang.

Einschätzung dieses Zusammenhangs. Hierfür bietet sich der (Pearson-)Korrelationskoeffizient $\rho_{\hat{\kappa}_i \hat{\kappa}_j}$ an

$$\rho_{\hat{\kappa}_i \hat{\kappa}_j} = \frac{\check{c}_{\hat{\kappa}_i \hat{\kappa}_j}}{s_{\hat{\kappa}_i} s_{\hat{\kappa}_j}} = \frac{\sum_{k=1}^{n_b} (\kappa_i^{(k)} - \bar{\kappa}_i)(\kappa_j^{(k)} - \bar{\kappa}_j)}{\sqrt{\sum_{k=1}^{n_b} (\kappa_i^{(k)} - \bar{\kappa}_i)^2} \sqrt{\sum_{k=1}^{n_b} (\kappa_j^{(k)} - \bar{\kappa}_j)^2}}. \quad (4.23)$$

Er wird immer zwischen zwei Größen gebildet und beschreibt den linearen Zusammenhang zwischen Diesen. Zudem ist er normiert auf das Intervall $[-1, 1]$. Bei einem Wert von $\rho_{\hat{\kappa}_i \hat{\kappa}_j} = \pm 1$ besteht ein eindeutig linearer Zusammenhang zwischen der Größe κ_i und der Größe κ_j , d.h. man kann in diesem Fall postulieren

$$\kappa_j = \pm a \kappa_i + b \quad \text{mit} \quad a, b \in \mathbb{R}. \quad (4.24)$$

In einem solchen Fall kann man eine der Variablen durch eine andere ersetzen. Daher ist die Analyse mit Hilfe der Statistik unerlässlich, wenn man schon frühzeitig bei der Modellbildung voneinander abhängige Variablen vermeiden bzw. eliminieren möchte. Die Korrelation zwischen zwei Parametern ist identisch Null, wenn beide Parameter statistisch unabhängig voneinander sind; sie beeinflussen sich nicht gegenseitig. Natürlich kann $\rho_{\hat{\kappa}_i \hat{\kappa}_j}$ innerhalb des Intervalls $[-1, 1]$ beliebige Werte annehmen.

Sollte $\rho_{\hat{\kappa}_i \hat{\kappa}_j} \neq 0$ gelten, so spricht man nicht automatisch von einem statistischen Zusammenhang. Der Korrelationskoeffizient ist erst dann signifikant, wenn er signifikant von Null verschieden ist. Dieses Signifikanzniveau kann man mit einem t -Test⁴ ermitteln. Erst wenn dieser positiv ausfällt, kann man die Aussage tätigen, zwischen $\hat{\kappa}_i$ und $\hat{\kappa}_j$ bestehe eine signifikante Korrelation.

Korrelationsmatrix

Vergleicht man mehrere Beobachtungsreihen, so kann man die Korrelationskoeffizienten analog zu Abschnitt 4.3.4 in einer Korrelationsmatrix anordnen. Dazu benötigt man neben der Kovarianzmatrix $\check{\mathbf{C}}_{\hat{\kappa}}$ die Varianzen, welche in der Kovarianzmatrix auf deren Hauptdiagonalen enthalten sind. Ordnet man diese entsprechend

$$\mathbf{V}_{\hat{\kappa}} = \text{diag} \{ s_{\hat{\kappa}_1}, \dots, s_{\hat{\kappa}_{n_{\kappa}}} \} = \begin{bmatrix} s_{\hat{\kappa}_1} & & \\ & \ddots & \\ & & s_{\hat{\kappa}_{n_{\kappa}}} \end{bmatrix} \quad (4.25)$$

in einer Matrix $\mathbf{V}(\mathbf{K})$ an, dann kann man für diese Kovarianzmatrix schreiben

$$\bar{\mathbf{R}}(\mathbf{K}) = \mathbf{V}^{-1} \check{\mathbf{C}}_{\mathbf{K}} \mathbf{V}^{-1}, \quad \bar{\mathbf{R}}(\mathbf{K}) \in \mathbb{R}^{n_{\kappa} \times n_{\kappa}}. \quad (4.26)$$

⁴Für eine Beschreibung des t -Tests sei an dieser Stelle auf die Literatur wie z.B. (Sachs und Hedderich, 2012) verwiesen.

Die Struktur ist ähnlich zu der der Kovarianzmatrix. Auf der Hauptdiagonalen stehen aufgrund der Normierung Einsen und die Nebendiagonalelemente $\rho_{\hat{\kappa}_i \hat{\kappa}_j}$ geben den Grad der Korrelation zwischen den Beobachtungsgrößen $\hat{\kappa}_i$ und $\hat{\kappa}_j$ an

$$\bar{\mathbf{R}}(\mathbf{K}) = \begin{bmatrix} \rho_{\hat{\kappa}_1 \hat{\kappa}_1} & \cdots & \rho_{\hat{\kappa}_1 \hat{\kappa}_{n_{\kappa}}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{\hat{\kappa}_{n_{\kappa}} \hat{\kappa}_1} & \cdots & \rho_{\hat{\kappa}_{n_{\kappa}} \hat{\kappa}_{n_{\kappa}}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & \rho_{\hat{\kappa}_1 \hat{\kappa}_{n_{\kappa}}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \rho_{\hat{\kappa}_{n_{\kappa}} \hat{\kappa}_1} & \cdots & 1 \end{bmatrix}. \quad (4.27)$$

4.4 Häufigkeitsverteilung

Neben der Charakterisierung von Daten mit Hilfe von Lage- und Streuungsmaßen besteht die Möglichkeit, die Verteilung der Daten in Form einer Häufigkeitsverteilung zu betrachten. Dabei werden beobachtete oder berechnete Werte, z.B. Messwerte einer Stichprobe, in verschiedene Klassen (d.h. Bereiche) eingeteilt und tabellarisch oder grafisch dargestellt. Beispielphaft ist dies in Abbildung 4.4 dargestellt. Die Art der Mess-

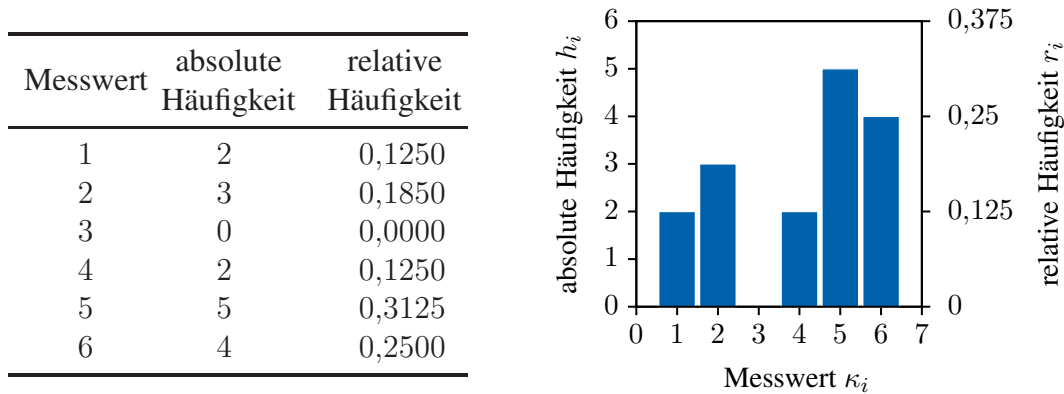


Abbildung 4.4: Beispiel einer Häufigkeitsverteilung

werte spielt dabei keine Rolle, es wird lediglich die Anzahl gezählt, sie entspricht der absoluten Häufigkeit.

4.4.1 Absolute und relative Häufigkeit

Die absolute Häufigkeit $h_i = h(\kappa^{(i)})$ einer Stichprobe mit n_b Werten ist die Anzahl des Auftretens vom jeweiligen Beobachtungswert $\kappa^{(i)}$. Die relative Häufigkeit r beschreibt die gleiche Aussage in relativer Form, d.h.

$$r_i = \frac{h_i}{n_b}. \quad (4.28)$$

Entsprechend ihrer Definitionen gilt

$$\sum_{i=1}^{n_b} h_i = n_b \quad \text{und} \quad \sum_{i=1}^{n_b} r_i = 1, \quad 0 \leq r_i \leq 1 \quad \forall i. \quad (4.29)$$

4.4.2 Histogramme

Bei der Darstellung von Messdaten in Form eines Histogramms werden diese in bestimmte Klassen (d.h. Bereiche) eingeteilt.

Stehen n_b Messwerte $\kappa^{(i)}$ zur Verfügung so werden h_i dieser Werte der Klasse i zugeordnet. Der Begriff Histogramm bezeichnet dabei die mathematische Funktion, welche die in einer Klasse auftretenden Messwerte zählt. Die grafische Darstellung in einem Balkendiagramm ist nur eine Darstellung. Im praktischen Gebrauch werden beide Begriffe häufig synonym verwendet, dies soll der Einfachheit halber auch in dieser Arbeit geschehen. Die Zusammenfassung von Daten in Klassen $\mathcal{K}_1, \dots, \mathcal{K}_{n_K}$ ist eine Kom-

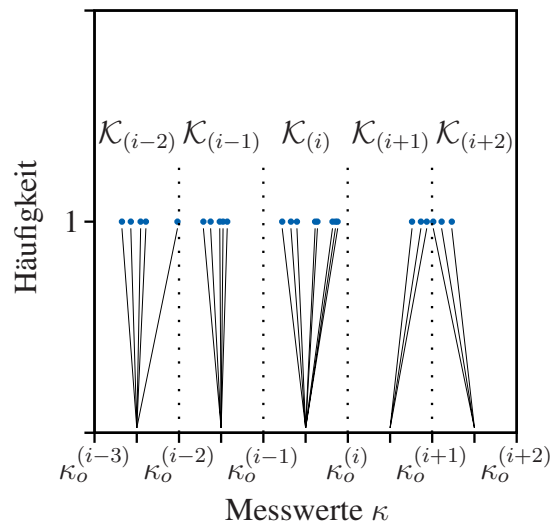


Abbildung 4.5: Einteilung von gemessenen Werten in Klassen

primierung und Strukturierung, um Aussagen über die Häufigkeitsverteilung der Daten treffen zu können. Die Größe n_K bezeichnet dabei die Anzahl der Klassen. Jede Klasse besitzt eine bestimmte Größe und wird durch die Klassengrenzen begrenzt. Die i -te Klasse wird dabei durch die obere $\kappa_o^{(i)}$ und untere Klassengrenze $\kappa_u^{(i)}$ definiert. Zu dieser Klasse gehören alle $\kappa^{(j)}$ für die gilt:

$$\kappa_u^{(i)} \leq \kappa^{(j)} < \kappa_o^{(i)} \quad \text{oder} \quad \kappa_u^{(i)} < \kappa^{(j)} \leq \kappa_o^{(i)} \quad (4.30)$$

Die nicht notwendigerweise gleichförmige Klassenbreite kann mit

$$\Delta \kappa^{(i)} = \kappa_o^{(i)} - \kappa_u^{(i)} \quad (4.31)$$

angegeben werden. Für die Randklassen, d.h. \mathcal{K}_1 und \mathcal{K}_{n_K} , kann das Intervall der Definition nach oben bzw. unten offen definiert werden. Dieses Vorgehen ist sinnvoll, wenn man nicht sicher sein kann, dass die kleinsten gemessenen Werte $\min \hat{\kappa}$ wirklich die kleinstmöglichen Werte darstellen.

Bei einer gleichförmigen Klassenbreite lässt sich diese sich gemäß

$$\Delta \kappa^{(i)} = \frac{\max \hat{\kappa} - \min \hat{\kappa}}{n_K} \quad (4.32)$$

berechnen. Es existiert keine allgemeingültige Regel, um die Anzahl $n_K \in \mathbb{N}$ der Klassen abzuschätzen. Oft findet man die Faustregel

$$n_K \approx \sqrt{n_b}. \quad (4.33)$$

Dabei entspricht n_K immer der nächstliegenden ganzen Zahl zu dem jeweiligen Ausdruck. Daneben gibt es eine Vielzahl von weiteren Regeln, so z.B. die Regel von Sturges ((Sturges, 1926)

$$n_K \approx \log_2 n_b + 1 \quad (4.34)$$

oder Scotts Regel ((Scott, 1979))

$$n_K \approx \frac{\max \hat{\kappa} - \min \hat{\kappa}}{3,49 \sigma} \sqrt[3]{n_b} \quad (4.35)$$

oder weitere, siehe z.B. (Freedman und Diaconis, 1981) oder (Knuth, 2006). Keine dieser Regeln ist allgemein gültig, alle haben mit Einschränkungen zu kämpfen, z.B. gilt Sturges Regel nur für normalverteilte Daten. Letztendlich bleibt es dem Anwender überlassen, nach welcher Maßgabe die Klassenbreite definiert wird.

Da zwischen den einzelnen Klassen keine Werte erlaubt sind, gilt für die Klassengrenzen

$$\kappa_o^{(i)} = \kappa_u^{(i+1)} \quad (4.36)$$

Sinn und Zweck der Einteilung in Klassen ist die Möglichkeit, kontinuierlich verteilte Mess- oder Beobachtungswerte innerhalb der Klassen zusammenzufassen und die Verteilung der Klassen z.B. graphisch darzustellen. Bei einer großen Anzahl von Beobachtungswerten (wie sie für eine statistische Auswertung nötig sind) erleichtert die Einteilung in Klassen eine Einschätzung der vorhandenen Daten. In Abbildung 4.6 sind die reinen Messdaten einer Messreihe als normales Diagramm (d.h. Messwert über der Nummer der Messung) und als Histogramm (absolute Häufigkeit über der Klassenbreite) dargestellt, um diesen Zusammenhang zu verdeutlichen.

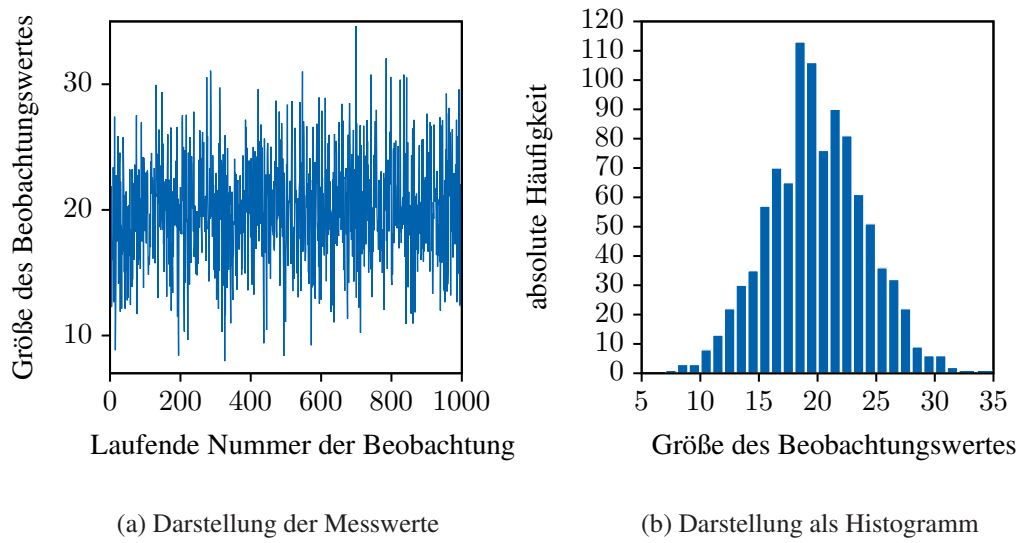


Abbildung 4.6: Vergleich der Darstellung von statistisch normalverteilten Messwerten

4.4.3 Empirische Verteilungsfunktion

Die Summe der relativen Häufigkeiten r_i , die kleiner sind als ein bestimmter Wert $\kappa^{(0)}$, wird als (kumulative) empirische Verteilungsfunktion $\hat{F}(\kappa)$ definiert. Von einer Stichprobe $\hat{\kappa} = \{\kappa^{(1)}, \kappa^{(2)}, \dots, \kappa^{(n_b)}\}$ gilt für deren empirische Verteilungsfunktion (vergleiche (Sachs und Hedderich, 2012))

$$\hat{F}(\kappa^{(0)}) = \frac{1}{n_b} \sum_{i=1}^j h_i \quad \text{für } \kappa^{(j)} \leq \kappa^{(0)}, j \geq i \quad (4.37)$$

$$\hat{F}(\kappa^{(0)}) = \frac{1}{n_b} [\text{Anzahl der Stichprobenwerte } \kappa^{(j)} \leq \kappa^{(0)}] \quad (4.38)$$

Die empirische Verteilungsfunktion beantwortet damit die Fragestellung, wie viele Werte unterhalb (oder indirekt oberhalb) eines bestimmten Beobachtungswertes liegen, vgl. Abbildung 4.7. Entsprechend des Gesetzes der großen Zahlen konvergiert die empirische Verteilungsfunktion $\hat{F}(\kappa)$ gegen die wahre (kontinuierliche) Verteilungsfunktion $F(\kappa)$. Sie beschreibt damit die Wahrscheinlichkeit, dass κ einen Wert kleiner oder gleich $\kappa^{(0)}$ annimmt.

Mit Hilfe der empirisch bestimmten Häufigkeitsverteilung der Stichprobe kann man (bei hinreichend großer Datenmenge) Rückschlüsse auf die Wahrscheinlichkeitsverteilung der zugrundeliegenden Grundgesamtheit ziehen. Die Wahrscheinlichkeitsverteilung ist zentraler Begriff der Wahrscheinlichkeitstheorie und der mathematischen Statistik.

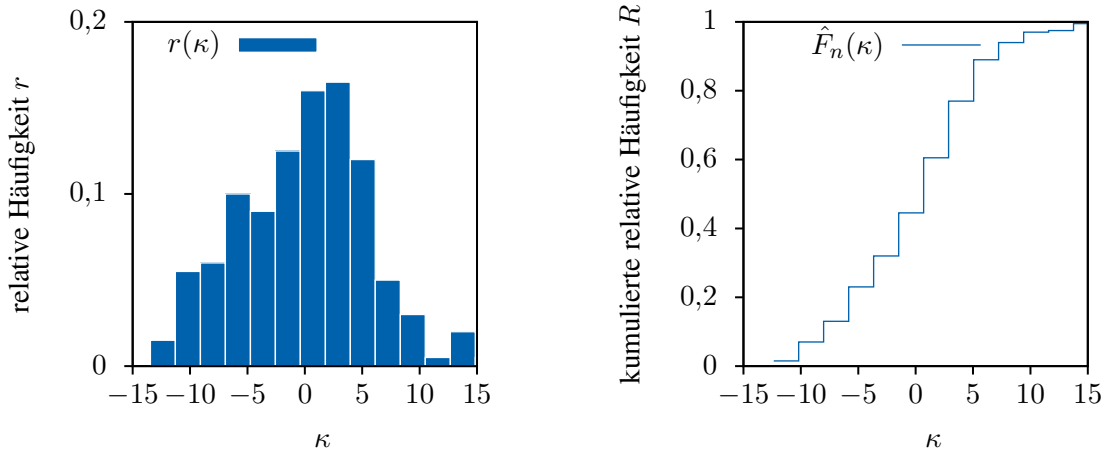


Abbildung 4.7: Darstellung der zu einem Histogramm zugehörigen Verteilungsfunktion

4.4.4 Wahrscheinlichkeitsdichte

Die Wahrscheinlichkeitsdichte der Wahrscheinlichkeitsrechnung ist die Ableitung der Verteilungsfunktion $F(\kappa)$, d.h.

$$f(\kappa) = \frac{dF(\kappa)}{d\kappa}. \quad (4.39)$$

Mit ihr lässt sich die Wahrscheinlichkeit berechnen, dass κ im Intervall $[\kappa_u, \kappa_o]$ liegt

$$P(\kappa \in [\kappa_u, \kappa_o]) = \int_{\kappa_u}^{\kappa_o} f(\kappa) d\kappa = F(\kappa_o) - F(\kappa_u). \quad (4.40)$$

Mit Hilfe der Wahrscheinlichkeitsdichte, lassen sich verschiedene Verteilungen definieren und untersuchen.

Im diskreten Fall gehen die Gleichungen (4.39) und (4.40) über zu

$$\hat{f}(\kappa) = \frac{\hat{F}(\kappa + \Delta\kappa) - \hat{F}(\kappa)}{\Delta\kappa} \quad (4.41)$$

bzw.

$$\hat{P}(\kappa \in [\kappa_u, \kappa_o]) = \sum_{\kappa_u}^{\kappa_o} \hat{f}(\kappa). \quad (4.42)$$

4.4.5 Normalverteilung

Im folgenden Abschnitt wird kurz auf die wichtige Normalverteilung eingegangen. Da weitere Wahrscheinlichkeitsverteilungen in dieser Arbeit keine Rolle spielen sie für eine

Vertiefung dieser Thematik auf z.B. (Sachs und Hedderich, 2012) und (Bosch, 1999) verwiesen.

4.5 Wahrscheinlichkeitsverteilungen

In den folgenden Abschnitten sollen kurz einige wichtige Verteilungen beschrieben und charakterisiert werden, die aufgrund ihrer wesentlichen Bedeutung zumindest erwähnt werden sollen. Natürlich stellen diese nur einen Bruchteil der denk- und verfügbaren Wahrscheinlichkeitsverteilungen dar. Da der größte Fokus dieser Arbeit auf der Normalverteilung liegt, wird auf diese besonders eingegangen. Es wird zudem empfohlen die reichhaltige Standardliteratur zur Wahrscheinlichkeitsrechnung und Stochastik wie z.B. (Sachs und Hedderich, 2012) und (Bosch, 1999) zu Rate zu ziehen.

4.5.1 Normalverteilung

Die bekannteste und aufgrund des zentralen Grenzwertsatzes (vgl. Abschnitt 4.5.3) wohl wichtigste Verteilung ist die Normalverteilung. Besitzt eine Stichprobe den Mittelwert $\mu = \bar{\kappa}$ und die Standardabweichung $\sigma = s_{\bar{\kappa}}$ und so gilt für ihre Wahrscheinlichkeitsdichte

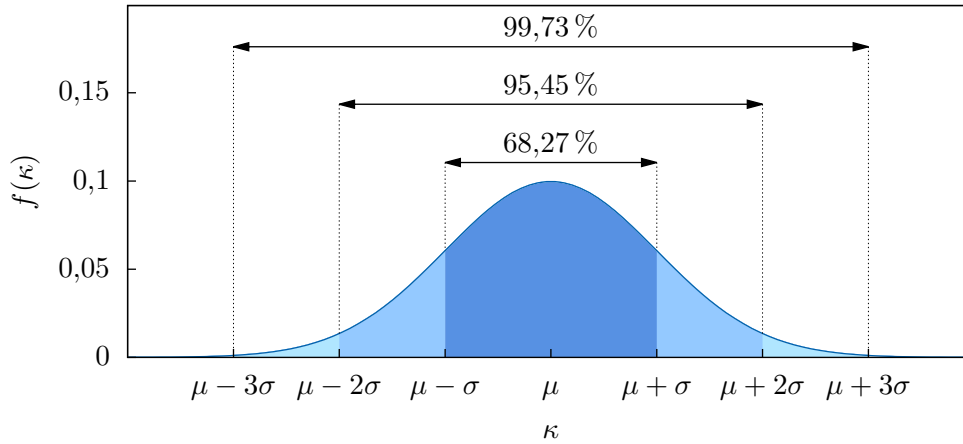
$$f(\kappa) = \frac{1}{\sqrt{2\sigma^2\pi}} e^{-\frac{(\kappa-\mu)^2}{2\sigma^2}} \quad (4.43)$$

Die Zufallsvariable ist normalverteilt mit μ und σ^2 . Man schreibt die Normalverteilung in Abhängigkeit der Varianz und des Erwartungswertes auch als $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$. Sie ist symmetrisch um den Mittelwert μ mit einem Maximum von $f_{\max} = 1/\sqrt{2\pi\sigma^2}$ und Wendepunkten bei $\kappa = \mu \pm \sigma$. Zudem ist sie normiert, d.h. der Flächeninhalt der Normalverteilung ist immer 1. Der Mittelwert verschiebt die Kurve entlang der κ -Achse und die Standardabweichung σ bestimmt die Breite. Für die Werte $\mu = 0$ und $\sigma = 1$ spricht man von der Standardnormalverteilung $\mathcal{N}(0, 1)$.

Die Mess- und Beobachtungswerte vieler Prozesse lassen sich durch eine Normalverteilung beschreiben. Etwa 68,27 % aller Werte einer normalverteilten Größe liegen im Intervall $[\mu - \sigma, \mu + \sigma]$ und etwa 99,73 % im Intervall $[\mu - 3\sigma, \mu + 3\sigma]$. Dieser Umstand ist in Abbildung 4.8 dargestellt. Es ist deutlich, dass man bei normalverteilten Messwerten so deren Unsicherheit mit Hilfe der statistisch ermittelten Größen μ und σ angeben kann.

4.5.2 t-Verteilung

Bisher wurde davon ausgegangen, dass die Stichprobenvarianz $s_{\bar{\kappa}}^2$ und die Varianz der Grundgesamtheit σ^2 identisch oder zumindest näherungsweise gleich sind. Diese Annahme gilt für eine große Anzahl an Beobachtungswerten n_b . Ebenfalls sind streng genommen der Mittelwert der Grundgesamtheit μ und der Mittelwert der Stichprobe $\bar{\kappa}$


Abbildung 4.8: Normalverteilung für $\mu = 4$ und $\sigma = 4$

nicht identisch. Für kleine n_b und eine $\mathcal{N}(\mu, \sigma^2)$ normalverteilte Grundgesamtheit kann man bei bekanntem Mittelwert μ die Varianz der Grundgesamtheit σ mit Hilfe der t -Verteilung abschätzen. Dabei kommt es zu Abweichungen, welche mit steigendem n_b immer kleiner werden. Die t -Verteilung besitzt die Wahrscheinlichkeitsdichte

$$f_\nu(\kappa) = \frac{\Gamma\left(\frac{\nu+1}{2}\right)}{\sqrt{\nu\pi}\Gamma\left(\frac{\nu}{2}\right)} \left(1 + \frac{\kappa^2}{\nu}\right)^{-\frac{\nu+1}{2}} \quad (4.44)$$

mit den Freiheitsgraden ν und der Gamma-Funktion $\Gamma(\kappa)$

$$\Gamma(\kappa) = \int_0^{+\infty} t^{\kappa-1} e^{-t} dt. \quad (4.45)$$

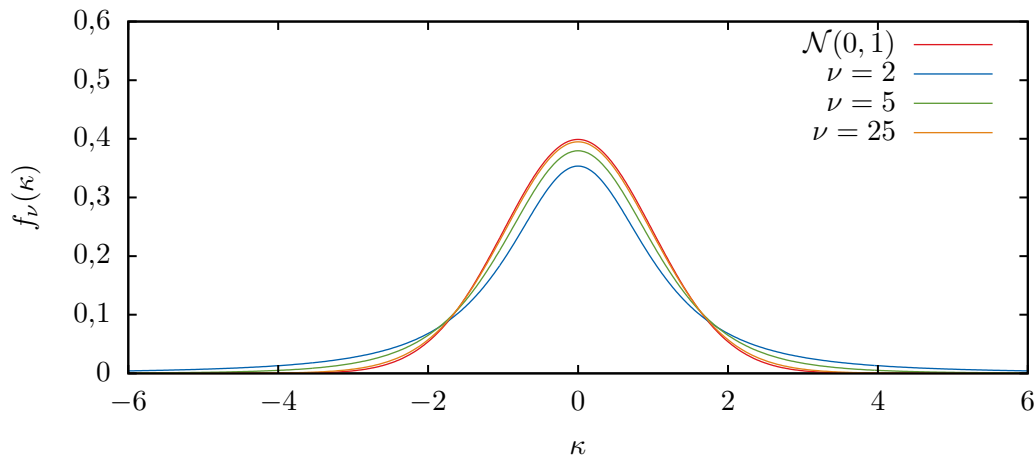
Für größer werdende ν strebt die t -Verteilung gegen die $\mathcal{N}(0, 1)$ -Verteilung (vgl. Abbildung (4.9)). Die Freiheitsgrade ν entsprechen dabei der Differenz aus dem Stichprobenumfang n_b und der Anzahl n_κ der zu schätzenden Parameter, d.h.

$$\nu = n_b - n_\kappa. \quad (4.46)$$

Die Besonderheit der t -Verteilung liegt vor allem in der Unabhängigkeit dieser von μ und σ , sie hängt nur von der Anzahl der Freiheitsgrade ν ab. Man kann den sogenannten t -Wert berechnen

$$t_{n_b-1} = \frac{\bar{\kappa} - \mu}{s_{\hat{\kappa}}/\sqrt{n_b}}, \quad (4.47)$$

welcher in Abschnitt 4.6 an Bedeutung gewinnen wird.


Abbildung 4.9: t -Verteilung

4.5.3 Zentraler Grenzwertsatz

Eine wichtige Erkenntnis der Stochastik und Statistik ist der zentrale Grenzwertsatz, siehe z.B. (Sachs und Hedderich, 2012). Dieser besagt, dass sich jede Verteilung von zueinander unabhängigen Zufallsvariablen für eine sehr große Anzahl ($n_b \rightarrow \infty$) an Durchführungen des zugehörigen Zufallsexperiments gegen die Standardnormalverteilung $\mathcal{N}(0, 1)$ konvergiert. Ist $P(\kappa)$ die Wahrscheinlichkeit für das Eintreten des Ereignisses κ und betrachtet man eine große Zahl identisch verteilter Beobachtungen κ (d.h. $n_b \rightarrow \infty$, alle Beobachtungen haben denselben Mittelwert $\bar{\kappa}$ und dieselbe Varianz $\text{Var}(\kappa) = \sigma^2$), so gilt

$$\lim_{n_b \rightarrow \infty} P \left(\left(\frac{1}{s\sqrt{n_b}} \sum_{i=1}^{n_b} \kappa_i - n_b \bar{\kappa} \right) < z \right) = \Phi(z), \quad (4.48)$$

wenn $\Phi(z)$ die Verteilungsfunktion der Standard-Normalverteilung $\mathcal{N}(0, 1)$ ist.

4.6 Vertrauen in statistische Aussagen

Im Gegensatz zu deterministischem Vorgehen kann die Statistik stets nur Wahrscheinlichkeitsaussagen treffen. Damit ist man in der Lage, anzugeben, wie sicher eine getroffene Aussage ist. Dabei ist man an konkreten Maßzahlen für die Quantifizierung dieser Sicherheit interessiert.

4.6.1 Konfidenzintervall

Wurde ein Parameter κ identifiziert, so ist es von Interesse, wie stark dieser berechneten Lösung vertraut werden kann. Im Zuge der Statistik sucht man Grenzen, innerhalb derer der identifizierte Wert mit einer bestimmten Wahrscheinlichkeit γ liegt. Man sucht also eine obere κ_o und untere κ_u Grenze, innerhalb derer man κ mit einer Wahrscheinlichkeit γ erwarten kann, d.h.

$$P(\kappa_u \leq \kappa \leq \kappa_o) \geq \gamma. \quad (4.49)$$

Das Intervall $[\kappa_u, \kappa_o]$ heißt Konfidenzintervall von κ mit dem Konfidenzniveau γ . Für eine hinreichend große Anzahl n_b der durchgeführten Experimente ist man zu γ sicher, den wahren Wert des Parameters innerhalb dieses Intervalls zu finden.

Handelt es sich dabei um eine Normalverteilung, so kann man folgende Überlegung zugrunde legen. Werden mehrere Messungen durchgeführt und dafür jeweils Schätzwerte $\kappa_1, \dots, \kappa_4$ ermittelt und möchte man sich mindestens zu $\gamma = 68,27\%$ sicher sein, dass der wahre (einem selbst unbekannte) Wert $\bar{\kappa} \approx \mu$ in seinem Konfidenzintervall liegt, so entspricht dieses Intervall genau der Länge $s_{\hat{\kappa}}$. Beispielhaft ist dies in Abbildung 4.10 dargestellt. Die gefüllte Fläche enthält 68,27 % aller Werte. Zusätzlich sind fünf demonstrative Werte und deren Konfidenzintervall eingezeichnet. Das Konfidenzintervall für die Werte $\kappa_1, \dots, \kappa_4$ beträgt gerade $s_{\hat{\kappa}_i}$, $i = 1, \dots, 4$. Das fünfte Intervall mit dem Zentrum κ_5 und der Standardabweichung $s_{\hat{\kappa}_5}$ zeigt zur Veranschaulichung ein Konfidenzintervall, für ein Konfidenzniveau von $\gamma = 0,9976$.

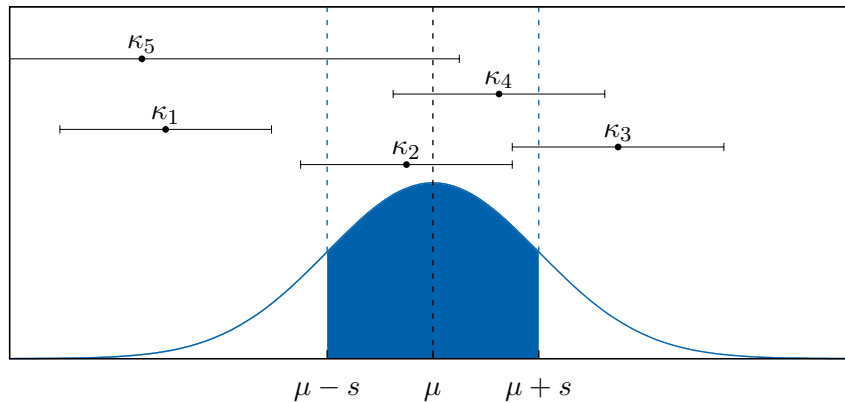


Abbildung 4.10: Konfidenzintervall

Die Schätzwerte innerhalb des γ -Konfidenzintervalls um den Parameter $\hat{\kappa}_i$ stellen 100 γ Prozent aller Stichprobenkennwerte dar. Anders formuliert bedeutet dies: Mit einer

Wahrscheinlichkeit von $100\gamma\%$ befindet sich der wahre Wert innerhalb des Konfidenzintervalls. Für $\hat{\kappa}_5$ ist diese Wahrscheinlichkeit größer, da das Konfidenzintervall größer ist. Die Größe des Konfidenzintervalls zusammen mit der Angabe der Wahrscheinlichkeit γ charakterisiert so die Sicherheit der Aussage, dass sich der wahre Wert μ innerhalb des Intervalls $\bar{\kappa} \pm \Delta\kappa$ befindet.

Nicht alle Stichproben sind exakt normalverteilt. Man nimmt trotzdem an, dass zufällige Stichproben einer Normalverteilung zumindest in Näherung folgen. Um diese Näherung zu beschreiben nutzt man die t -Verteilung (siehe Abschnitt 4.5.2).

Das empirische Konfidenzintervall einer t -Verteilung mit n_b Freiheitsgraden, einem Konfidenzniveau γ und dem (empirisch bestimmten) Mittelwert $\bar{\kappa}$ ist mit der empirischen Standardabweichung $s_{\hat{\kappa}}$ gegeben als

$$\kappa \pm \Delta\kappa = \bar{\kappa} \pm t_{n_b-1, 1-\gamma/2} \frac{s_{\hat{\kappa}}}{\sqrt{n_b}} \quad (4.50)$$

bzw.

$$\left[\bar{\kappa} - t_{n_b-1, 1-\gamma/2} \frac{s_{\hat{\kappa}}}{\sqrt{n_b}}, \bar{\kappa} + t_{n_b-1, 1-\gamma/2} \frac{s_{\hat{\kappa}}}{\sqrt{n_b}} \right]. \quad (4.51)$$

Dafür wird die Notation $t_{\nu, \alpha}$ verwendet. Dabei sind ν die Freiheitsgrade der untersuchten Verteilung und α das interessierende Quantil⁵. Die Vertrauenswahrscheinlichkeit von Gleichung (4.50) liegt bei $(1 - \gamma)$. Da die t -Verteilung nur von den Freiheitsgraden abhängt, kann der Zusammenhang zu den Quantilen tabellarisch angegeben werden. Eine entsprechende Tabelle ist im Anhang Abschnitt 1 zu finden. Für bestimmte Quantile γ und Freiheitsgrade ν sind dort die entsprechenden Werte der t -Verteilung tabelliert. Damit erhält man als Aussage, dass im Mittel der Anteil γ aller Stichproben den wahren Wert des Parameters enthalten werden.

Darüber hinaus existiert eine große Anzahl an verschiedenen Herangehensweisen, um ein Konfidenzintervall zu bestimmen. Newcombe (1998) vergleicht verschiedene Methoden zur Bestimmung der Konfidenzintervalle. Da sich die hier vorliegende Arbeit nur mit der Betrachtung von (näherungsweise) normalverteilten Größen beschäftigt, werden nur diesbezüglich relevante Konfidenzintervalle angegeben.

4.6.2 Signifikanz der Korrelation

Der Korrelationskoeffizient liefert ein auf den ersten Blick etwas unklares Maß, hinsichtlich einer gesicherten Aussage über die Korrelation zweier Größen. Daher ist von Interesse, inwiefern eine Korrelation bedeutsam ist. Eine reine Betrachtung des Korrelationskoeffizienten $\rho_{\kappa_1 \kappa_2} = [-1, 1]$ liefert noch keine klare Aussage über die Korrelation

⁵Ein Quantil Q_γ einer Ordnung γ gibt an, dass der Anteil γ einer Verteilung unterhalb des Wertes Q liegen, vgl. (Sachs und Hedderich, 2012)

von κ_1 und κ_2 . Um diese zu treffen bedient man sich eines t -Tests (vgl. z.B. (Sachs und Hedderich, 2012)). Dazu berechnet man den Testwert t nach

$$t = \frac{\rho_{\kappa_1\kappa_2}\sqrt{\nu}}{\sqrt{1 - \rho_{\kappa_1\kappa_2}^2}}. \quad (4.52)$$

Dabei sind die Freiheitsgrade $\nu = n_b - n_\kappa$ durch die Anzahl der n_b der Werte und $n_\kappa = 2$ (Die Anzahl der bei dem Korrelationskoeffizienten zu vergleichenden Parameter) gegeben. Den so gewonnenen Wert t vergleicht man mit dem $t_{n_b-2, \alpha/2}$ -Wert, bei dem α die Vertrauenswahrscheinlichkeit angibt. Eine tabellarischer Vergleich ist u.a. mit der im Anhang Abschnitt 1 aufgeführten Tabelle möglich.

Beispiel Ein Korrelationkoeffizient von $\rho_{\kappa_1\kappa_2} = 0,8$ bei einer Anzahl von $n_b = 20$ Werten liefert den Wert $t = 9,428$. Dieser ist größer als $t_{18,0,999} = 3,610$, d.h. man kann mit 99,9-prozentiger Sicherheit sagen, dass beide Parameter miteinander statistisch korrelieren.

4.7 Unsicherheiten und Messfehler

Sämtliche gemessenen Größen unterliegen Unsicherheiten, die im Allgemeinen kurz als (Mess-)Fehler⁶ bezeichnet werden. Man unterscheidet dabei zwischen zufälligen und systematischen Fehlern. Hat man eine (abstrakte) Messgröße⁷ κ gemessen, so wird die Unsicherheit meistens mit dem absoluten Fehler $\Delta\kappa$ bezeichnet und immer in Verbindung mit κ angegeben, d.h. $\kappa \pm \Delta\kappa$. Im Folgenden soll neben einer genaueren Spezifikation der mathematische Umgang mit Messunsicherheiten erläutert werden. Da nur wenige Größen direkt gemessen werden können, d.h. da sich die meisten Größen aus der Messung mehrerer fehlerbehafteter Größen berechnen lassen, ist es nötig, die Messfehler in der Berechnung entsprechend zu berücksichtigen. Grundsätzlich gilt für jegliche Fehlermaße

$$\Delta\kappa \geq 0. \quad (4.53)$$

Zufällige Fehler

Zufällige Fehler resultieren aus der Messungenauigkeit der Messinstrumente und des Messverfahrens. Sie sind unvermeidlich und müssen entsprechend berücksichtigt werden. Zufällige Fehler zeichnen sich dadurch aus, dass sie zufällig, d.h. einer Normalverteilung folgend, um einen bestimmten Mittelwert schwanken.

⁶Häufig werden die Begriffe *Fehler* und *Unsicherheit* synonym gebraucht. Dies soll auch in dieser Arbeit geschehen. Allerdings soll angemerkt werden, dass teilweise Wert darauf gelegt wird, zwischen beiden Begriffen zu unterscheiden, da *Fehler* etwas Vermeidbares implizieren kann, so dass *Unsicherheit* grundsätzlich sprachlich genauer ist.

⁷In dem Fall dieser Arbeit soll es sich dabei stets um Materialparameter κ handeln.

Systematische Fehler

Systematische Fehler sind Fehler, die das Messergebnis in einer bestimmten Weise konsistent beeinflussen, d.h. das Messergebnis ist in eine Richtung gegenüber dem wahren Wert verschoben. In vielen Fällen können systematische Fehler nachträglich korrigiert werden. Das Grundproblem besteht immer darin, zu erkennen, dass ein systematischer Fehler vorliegt. Dies kann zum Beispiel ein falsch kalibriertes Werkzeug sein oder unberücksichtigte Einflüsse wie z.B. Wärme oder Abnutzung von Gerätschaften.

Standardfehler des Mittelwerts

Misst man mehrere Beobachtungswerte $\hat{\kappa}$, so beschreibt $s_{\hat{\kappa}}$ die Standardabweichung der Einzelwerte. Letztendlich ist (besonders in dieser Arbeit) der Mittelwert $\bar{\kappa}$ von Interesse, für den ein entsprechendes Fehlermaß notwendig ist. Man definiert den sogenannten Standardfehler des Mittelwerts als

$$\Delta\bar{\kappa} = \frac{s_{\hat{\kappa}}}{n_b} = s_{\bar{\kappa}}. \quad (4.54)$$

Je mehr Beobachtungen eine Messung enthält, desto kleiner wird der Standardfehler. Aufgrund der Annahme einer Normalverteilung befindet sich der wahre Mittelwert μ zu 68 % innerhalb des Intervalls $[\bar{\kappa} - \Delta\bar{\kappa}, \bar{\kappa} + \Delta\bar{\kappa}]$.

4.7.1 Lineare Fehlerfortpflanzung

Wird die interessierende Größe durch ein mathematisches Modell

$$y = \hat{y}(\kappa) \quad (4.55)$$

beschrieben (vgl. (Barlow, 1993) oder (Taylor, 1997)), so kann bei Kenntnis der Unsicherheit bzw. der Streuung der Eingangsgrößen $\Delta\bar{\kappa}$ auf die Streuung der Ergebnisgrößen des Modells geschlossen werden. Mit einer Taylor-Entwicklung bei der Störung der Eingangswerte κ um $\Delta\kappa$ ergibt sich

$$y(\kappa + \Delta\kappa) \approx y(\kappa) + \sum_{k=1}^{n_b} \frac{1}{k!} \frac{\partial^k y(\kappa)}{\partial \kappa^k} (\Delta\kappa)^k, \quad (4.56)$$

wobei bei kleinem Fehler $\Delta\kappa$ die Reihe nach dem ersten Glied abgebrochen werden kann, was für den Fehler der Funktion $y(\kappa)$

$$\Delta y = |y(\kappa + \Delta\kappa) - y(\kappa)| = \left| \frac{dy(\kappa)}{d\kappa} \right| \Delta\kappa \quad (4.57)$$

liefert. Hängt die Funktion von mehreren Veränderlichen ab, so werden deren Fehler addiert, d.h.

$$y = \hat{y}(\kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_{n_\kappa}), \quad (4.58)$$

$$\Delta y = \left| \frac{\partial y}{\partial \kappa_1} \right| \Delta \kappa_1 + \left| \frac{\partial y}{\partial \kappa_2} \right| \Delta \kappa_2 + \dots + \left| \frac{\partial y}{\partial \kappa_{n_\kappa}} \right| \Delta \kappa_{n_\kappa}. \quad (4.59)$$

Gleichung (4.59) gibt dabei den maximal zu erwartenden Fehler an.

4.7.2 Gaußsche Fehlerfortpflanzung

Im Gegensatz zum maximal möglichen Fehler ist es wahrscheinlich, dass sich die Messfehler verschiedener Messgrößen zumindest teilweise gegenseitig kompensieren, (Barlow, 1993). Es ist plausibel anzunehmen, dass die zufälligen Fehler vieler Wiederholungsmessungen normal um den Mittelwert herum verteilt sind. Diese Annahme ist aufgrund des Zentralen Grenzwertsatzes und des Gesetzes der großen Zahlen gerechtfertigt. Folgt die Verteilung der Beobachtungswerte einer bestimmten Wahrscheinlichkeitsverteilung (diese wird durch die Messmethode beeinflusst), so wird sie für eine sehr große Anzahl an Messungen gegen ihren Mittelwert (den wahren Messwert) μ streben (Gesetz der großen Zahlen) und eine Normalverteilung um diesen annehmen (zentraler Grenzwertsatz). Nähere Informationen dazu sind in z.B. (Hübner, 2009), (Dehling und Haupt, 2004) oder (Barlow, 1993) zu finden.

Häufig sind die das Messergebnis $y(\bar{\kappa})$ beeinflussenden Größen $\hat{\kappa}$ voneinander unabhängig. Mit der Sortierung der empirischen Mittelwerte $\bar{\kappa}^{(i)}$ in einen Vektor $\bar{\kappa} = \{\bar{\kappa}^{(1)}, \dots, \bar{\kappa}^{(N)}\}^T$ kann für die Funktion $y(\bar{\kappa})$ der Fehler durch berechnet werden nach

$$\Delta y^2 = \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{\kappa}_1} \Delta \bar{\kappa}_1 \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{\kappa}_2} \Delta \bar{\kappa}_2 \right)^2 + \dots + \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{\kappa}_{n_\kappa}} \Delta \bar{\kappa}_{n_\kappa} \right)^2. \quad (4.60)$$

Allerdings gilt diese Gleichung nur, solange sich die Funktion $y(\bar{\kappa}_1, \dots, \bar{\kappa}_{n_\kappa})$ näherungsweise linear verhält. Ist dies nicht der Fall, so muss noch die Abhängigkeit zwischen den verschiedenen Eingangsgrößen berücksichtigt werden. Für eine eindimensionale Funktion gilt

$$\Delta y^2 = \sum_{i=1}^{n_\kappa} \left(\frac{dy}{d\bar{\kappa}_i} \Delta \bar{\kappa}_i \right)^2 + \sum_{i=1}^{n_\kappa} \sum_{\substack{j=1 \\ i \neq j}}^{n_\kappa} \left(\frac{\partial y}{\partial \bar{\kappa}_i} \frac{\partial y}{\partial \bar{\kappa}_j} \check{c}_{\bar{\kappa}_i \bar{\kappa}_j} \right), \quad (4.61)$$

mit den Kovarianzen $\check{c}_{\bar{\kappa}_i \bar{\kappa}_j}$ (vergleiche dazu Abschnitt 4.3.3).

Mit Kenntnis der Kovarianzmatrix $\check{\mathbf{C}}_{\bar{\kappa}}$ (vgl. Gleichung (4.22) und Gleichung (4.7)) kann Gleichung (4.61) in einer Matrixnotation formuliert werden. Das betrachtete Mo-

dell sei nun eine vektorwertige Funktion, d.h. $\mathbf{y}(\hat{\kappa})$ hängt von $\hat{\kappa}$ ab. Damit gilt

$$\left[\frac{d\mathbf{y}}{d\hat{\kappa}} \right] = \begin{bmatrix} \frac{\partial y_1}{\partial \kappa_1} & \cdots & \frac{\partial y_1}{\partial \kappa_{n_\kappa}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial y_{n_y}}{\partial \kappa_1} & \cdots & \frac{\partial y_{n_y}}{\partial \kappa_{n_\kappa}} \end{bmatrix}. \quad (4.62)$$

Nun kann man die Kovarianzmatrix von \mathbf{y} berechnen nach

$$\check{\mathbf{C}}_{\mathbf{y}} = \left[\frac{d\mathbf{y}}{d\hat{\kappa}} \right] \check{\mathbf{C}}_{\hat{\kappa}} \left[\frac{d\mathbf{y}}{d\hat{\kappa}} \right]^T. \quad (4.63)$$

Die Diagonalelemente von $\check{\mathbf{C}}_{\mathbf{y}}$ enthalten die Varianzen der Anteile der Funktion $\mathbf{y}(\hat{\kappa})$, d.h.

$$\Delta y_i = \sqrt{\check{C}_{ii}(y)} = s_{y_i} \quad (4.64)$$

was Gleichung (4.61) entspricht.

4.7.3 Fehlerfortpflanzung höherer Ordnung

Grundsätzlich ist es möglich bei der Berechnung der Unsicherheiten auch Terme höherer Ordnung zu nutzen. Mit Blick auf die Taylor-Entwicklung wird klar, dass für jeden Term höherer Ordnung auch Ableitungen entsprechend der Ordnung bereitgestellt werden müssen. Für eine skalare Funktion $y(\kappa)$ bedeutet dies bei Berücksichtigung der zweiten Ordnung (für zwei voneinander unabhängige Variablen κ_1 und κ_2)

$$\Delta y = \left(\frac{\partial y}{\partial \kappa_1} \Delta \kappa_1 \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \kappa_2} \Delta \kappa_2 \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 y}{\partial \kappa_1 \kappa_2} \Delta \kappa_1 \Delta \kappa_2 \right)^2 \quad (4.65)$$

$$+ \gamma \left(\frac{\partial y}{\partial \kappa_1} \frac{\partial^2 y}{\partial \kappa_1} \Delta \kappa_1^3 + \frac{\partial y}{\partial \kappa_2} \frac{\partial^2 y}{\partial \kappa_2} \Delta \kappa_2^3 \right) \quad (4.66)$$

$$+ \frac{(\omega - 1)}{4} \left(\left(\frac{\partial^2 y}{\partial \kappa_1^2} \right)^2 \Delta \kappa_1^4 + \left(\frac{\partial^2 y}{\partial \kappa_2^2} \right)^2 \Delta \kappa_2^4 \right) \quad (4.67)$$

Die Größen der Schiefe (γ) und Wölbung (ω) sind weitere Maße zur Charakterisierung von Verteilungen und sind wie folgt definiert:

$$\gamma_{\hat{\kappa}} = \frac{1}{n_b s_{\hat{\kappa}}^3} \sum_{i=1}^{n_b} (\kappa^{(i)} - (\bar{\kappa}))^3, \quad (4.68)$$

$$\omega_{\hat{\kappa}} = \frac{1}{n_b s_{\hat{\kappa}}^4} \sum_{i=1}^{n_b} (\kappa^{(i)} - (\bar{\kappa}))^4. \quad (4.69)$$

Es ist erkennbar, dass die zweifachen Ableitungen der Funktion $y(\boldsymbol{\kappa})$ notwendig sind. Die Berechnung der ersten Ableitungen erfordert einen zusätzlichen numerischen Aufwand von n_b , die zweiten Ableitungen benötigen schon den n_b^2 -fachen Aufwand. Damit ist eine Berechnung zwar möglich, wird aber in dieser Arbeit nicht weiter diskutiert, da dies sämtliche Zusammenhänge deutlich verkomplizieren würde. Weiter Informationen zu diesem Thema finden sich z.B. in (Mekid und Vaja, 2008) und (Sudret, 2007).

5 Sensitivitätsanalyse

5.1 Einführung

Die Sensitivitätsanalyse ist in den vergangenen Jahrzehnten fester Bestandteil der Simulation von komplexen Modellen geworden. Sie wird in Büchern wie (Cacuci, 2003), (Saltelli et al., 2004) oder (Kleiber et al., 1997) ausführlich dargestellt. Sie beschreibt allgemein die Analyse von mathematisch modellierten Systemen hinsichtlich verschiedener Parameter. Die Sensitivitätsanalyse ist notwendig, um die wichtigsten Aspekte eines Systems zu verstehen. Allein zum Verständnis, wie sensitiv ein System gegenüber der Änderung seiner bestimmenden Parameter ist, ist eine solche Analyse notwendig. Adelman und Haftka (1986) geben einen groben Überblick über die verschiedenen Methoden der Sensitivitätsanalyse. Die betreffende Literatur umfasst eine Vielzahl an Publikationen.

Die Sensitivitätsanalyse findet unter anderem Anwendung in der Strukturoptimierung (vgl. (Haug, 1976) und (Ryu et al., 1985)) oder der Designoptimierung von Modellen und Experimenten (Kleijnen, 2005). (Saltelli, 2002) beschreibt die Anwendung der Sensitivitätsanalyse für eine Risikoanalyse bezogen auf die Lagerung von nuklearen Abfällen. Es wird ebenfalls beschrieben, dass die Sensitivitätsanalyse durch Variation jedes Parameters für sich bestimmte Defizite aufweist. Eine Sensitivitätsanalyse angewendet auf pfadabhängige Probleme wird in (Tsay und Arora, 1990) beschrieben. Anstelle von komplexen rechenintensiven Modellen bietet es sich in einigen Fällen an, diese durch geeignete Ersatzmodelle zu beschreiben, dies wird u.a. von Weickum et al. (2006) gezeigt. Strukturmechanische Anwendung der Sensitivitätsanalyse lässt sich in z.B. (Jensen, 1995), (Cardoso, 1992) oder (Haftka und Adelman, 1989) finden. Eine Anwendung auf die Fehlerfortpflanzung und eine Interpretation der von Standardabweichungen und Korrelationskoeffizienten im Sinne der Fortpflanzung wird u.a. in (Hofer, 1999) angewandt. Anwendung in der Kontinuumsmechanik zeigt unter anderem Kleiber et al. (1997). Ein Konzept zur analytischen Berechnung der zur Sensitivitätsanalyse notwendigen Ableitungen für Elasto-Plastizität in Verbindung mit einer Materialparameteridentifikation wird von Mahnken und Stein (1997) aufgezeigt. Weitere Untersuchungen an elasto-plastischen Modellen werden z.B. in (Kreißig et al., 2001) und (Mahnken, 1998) durchgeführt. Als eine spezifische Technik für die Lösung von Systemen, welche bestimmten zufälligen Effekten unterliegen, hat sich als Erweiterung der klassischen Finite-Elemente-Methode (FEM) die sogenannte Stochastische-Finite-Elemente Methode (SFEM) entwickelt. In (Rosić und Matthies, 2008) wird u.a. inelastisches Material-

verhalten vom wahrscheinlichkeitstheoretischen Standpunkt aus betrachtet. Die SFEM erlebte ihren Aufschwung aufgrund der immer schneller werdenden Rechentechnik in den letzten Jahrzehnten (Kleiber et al., 1997) und nutzt häufig zur Untersuchung die Monte-Carlo Methode (Spanos und Zeldin, 1998). Dabei wird die Komplexität der zugrundeliegenden Modelle deutlich erhöht und so die Möglichkeit geschaffen, komplexe Systeme besser zu optimieren als mit deterministischen Methoden (Stefanou, 2009). Der Zusammenhang zur Optimierung von Parameter auf stochastischer Basis wird z.B. von (Rosić, 2013) untersucht.

Die vorgestellten Arbeiten und die darin zitierte Literatur bilden nur einen geringen Teil der zur Sensitivitätsanalyse verfügbaren Arbeiten. Umso erstaunlicher ist es, dass die eng mit der Sensitivitätsanalyse zusammenhängende Unsicherheitsanalyse im Bereich der Ingenieurwissenschaften bisher keine standardmäßige Anwendung findet.

5.2 Problemstellung

Das zu untersuchende System¹ besteht zumeist aus mathematischen Gleichungen, mit deren Hilfe sich aus vorgegebenen Eingabegrößen $\boldsymbol{\kappa}^T = \{\kappa_1, \kappa_2, \dots, \kappa_n\}$ ² eine bestimmte Zahl an Ausgabegrößen $\mathbf{y} = \mathbf{f}(\boldsymbol{\kappa})$ berechnen lassen. Die Eingabegrößen können im Zuge der Finiten-Elemente Methode z.B. Verzerrungen \mathbf{E} sein und die Ausgabegrößen können z.B. Knotenverschiebungen \mathbf{U}_{n+1} und Spannungen \mathbf{T} umfassen. Natürlich ist die Sensitivitätsanalyse für eine Vielzahl an wissenschaftlichen Gebieten gültig und etabliert, doch der Einfluss auf Finite-Elemente Simulationen soll an dieser Stelle im Vordergrund stehen.

Im Allgemeinen hängen alle in dem Modell enthaltenen Größen von der Zeit t ab, so dass man eine Struktur wie in Abbildung 5.1 untersucht. Wichtiger Bestandteil eines

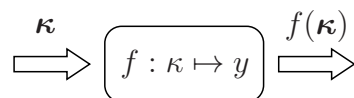


Abbildung 5.1: Aufbau eines mathematischen Modells

solchen Modells sind die sogenannten Designparameter $\boldsymbol{\kappa}$, die das System zusätzlich zu den mathematischen Gleichungen charakterisieren. Diese Parameter umfassen im Sinne der Finiten-Elemente Methode die Materialparameter $\boldsymbol{\kappa}$, geometrische Parameter wie z.B. die Höhe h eines Bauteils oder den Radius r sowie viele andere. Die Menge an denkbaren Parametereinflüssen auf die Ausgabe des Modells hängt vom Modell selbst sowie von der Problemstellung ab und kann so umfangreich wie vielfältig sein. Auch

¹In dieser Arbeit handelt es sich dabei um das der Methode der finiten Elemente zugrundeliegende Gleichungssystem.

²An dieser Stelle wird eine Notation mit Hinblick auf die Materialparameter $\boldsymbol{\kappa}$ gewählt, allerdings sind diese Parameter aus der allgemeinen Sicht der Sensitivitätsanalyse beliebige Parameter.

Parameter, welche die Anfangsbedingungen beeinflussen, gehören zu den Designparametern κ .

Die Vorgehensweise der Sensitivitätsanalyse ist nun, die Designparameter zu verändern und so deren Einfluss auf das Modell zu quantifizieren. Die grundlegende Frage lautet dabei:

"Wie sensitiv reagiert das betreffende System auf Veränderungen im jeweils untersuchten Parameter?"

Wichtig wird diese Frage aus der Überlegung heraus, dass alle Parameter, die in ein solches Modell eingehen, mit den verschiedensten Methoden bestimmt werden, vgl. Abbildung 5.2. Alle Parameter werden naturgemäß einer gewissen Streuung unterliegen, unabhängig davon ob diese Streuung technisch messbar ist oder nicht. Die Verteilungsfunktion der Ausgabe hängt daher direkt von der Verteilungsfunktion der Designparameter ab. Befindet sich das System noch in der Designphase, d.h. ist es noch im Aufbau, so lassen sich mit Hilfe der Sensitivitätsanalyse hilfreiche Rückschlüsse ziehen und grundlegende Designfehler vermeiden.

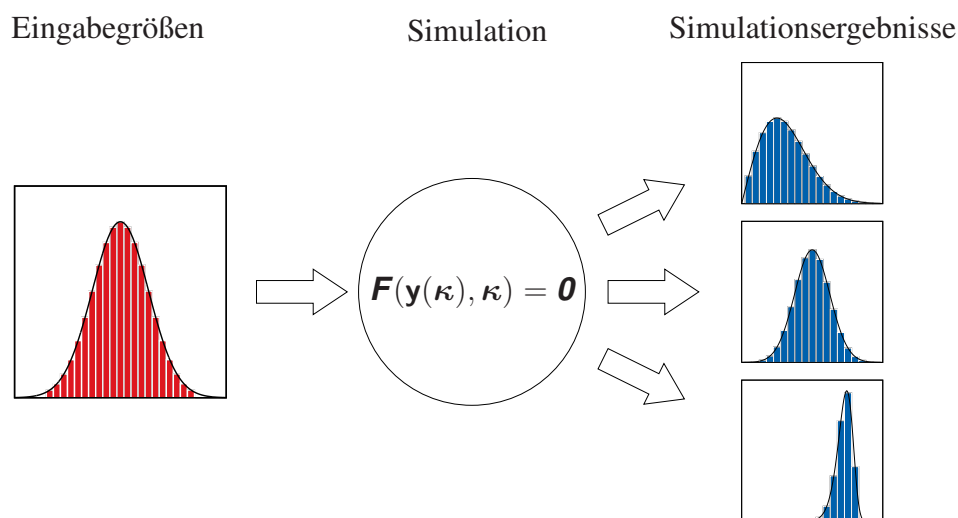


Abbildung 5.2: Sensitivitätsanalyse

Charakteristisch für die Beschreibung der Sensitivität sind die den jeweiligen Parameter betreffenden Gradienten (vgl. Gleichung (4.62)), diese enthalten zusammen mit dem Absolutwert der betreffenden Ausgabe wichtige Informationen über das Verhalten des Modells.

Betrachtet man die Funktion

$$F(y(\kappa), \kappa) = 0, \quad (5.1)$$

welche explizit von $\boldsymbol{\kappa}^T = \{\kappa_1, \dots, \kappa_{n_\kappa}\}$ und implizit durch eine Funktion $\mathbf{y}^T(\boldsymbol{\kappa}) = \{y_1(\boldsymbol{\kappa}), \dots, y_{n_y}(\boldsymbol{\kappa})\}$ von den Designparametern abhängt, so gilt für deren Ableitung

$$\frac{d\mathbf{F}}{d\kappa_i} = \sum_{j=1}^n \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial y_j} \frac{dy_j}{d\kappa_i} + \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \kappa_i}. \quad (5.2)$$

Die Bestimmung der Ableitungen ist notwendig, um Aussagen über das Verhalten des Systems zu machen. Weiterhin ist damit die Durchführung einer Fehlerfortpflanzung möglich. Kennt man dabei die den Designparametern zugrundeliegende Kovarianzmatrix $\check{\mathbf{C}}_\kappa$, dann kann man direkt auf die Kovarianzmatrix $\check{\mathbf{C}}_\mathbf{F}$ der Ausgabegrößen schließen

$$\check{\mathbf{C}}_\mathbf{F} = \left[\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \right] \check{\mathbf{C}}_\kappa \left[\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \right]^T. \quad (5.3)$$

Interpretiert man die Komponenten der Hauptdiagonalen von $\check{\mathbf{C}}_\kappa$ als Quadrate der Unsicherheiten bzw. Standardabweichungen von normalverteilten Designparametern, so erhält man damit die fortgepflanzten Fehler im Sinne des Modells.

Finite Differenzen

Wichtig für die Durchführung einer Sensitivitätsanalyse ist die Berechnung der Ableitungen der Modellgleichungen Gleichung (5.1) hinsichtlich der Designparameter $\boldsymbol{\kappa}$. Dafür bietet sich im einfachsten aller Fälle die Berechnung mit finiten Differenzen an. Diese besitzen bestimmte Nachteile, wie u.a. in (Haftka, 1985) aufgeführt und in vielen Publikationen hinreichend untersucht wurden, so z.B. (Eyi, 2011), (Haftka und Malkus, 1981), (Gill et al., 1983). Dabei wird die Funktion mit einer Störung h im jeweiligen Parameter κ_i berechnet und vom ursprünglichen Funktionswert abgezogen

$$\frac{d\mathbf{F}}{d\kappa_i} \approx \frac{\mathbf{F}(\kappa_1, \dots, \kappa_i + h, \dots, \kappa_{n_\kappa}) - \mathbf{F}(\kappa_1, \dots, \kappa_{n_\kappa})}{h}, \quad i = 1, \dots, n_\kappa, \quad (5.4)$$

was dem Vorwärtsdifferenzenquotienten entspricht. Kritisch ist dabei die Wahl der Schrittweite h . Wird h zu groß gewählt, so werden die Rundungsfehler der numerischen Berechnung zu groß. Wird h andererseits zu klein gewählt, so nehmen die sogenannten Konditionierungsfehler überhand. Es existieren in der Literatur zwar verschiedene Algorithmen, um h so abzuschätzen, dass die resultierenden Fehler möglichst klein bleiben (vergleiche (Gill et al., 1980)), allerdings existieren laut Haftka (1985) Systeme, in denen selbst ein solches Optimum keine befriedigenden Ergebnisse liefert.

Weitere Möglichkeiten zur Bestimmung der differenzierten Anteile von Modellgleichungen sind neben der analytischen Berechnung auch durch sogenannte Automatische Differentiation möglich, auf welche an dieser Stelle nicht näher eingegangen werden soll, mehr Informationen finden sich in (Griewank und Walther, 2008) und (Naumann, 2012). Eine Gegenüberstellung der drei genannten Methoden bei der Anwendung auf finite Elemente findet sich z.B. in (Rothe und Hartmann, 2014).

5.3 Sensitivitätsanalyse im Sinne der Finite-Elemente Methode

Im Zuge der Finite-Elemente Methode handelt es sich bei den Modellgleichungen um die konstitutiven Gleichungen, mit deren Hilfe sich die Antwort des Systems (d.h. Größen wie Spannungen, Knotenverschiebungen, Verzerrungen etc.) berechnen lässt.

Bei elastischen oder hyperelastischen Materialmodellen handelt es sich um Modelle, welche nicht von der Zeit abhängig sind und somit auch kein geschichtsabhängiges Verhalten von Materialien abbilden können. Modelle vom Raten-Typ, wie z.B. das Modell der Viskoplastizität, führen wegen ihrer Zeitabhängigkeit und dem Vorhandensein von inneren Variablen auf ein DAE-System, welches zeitlich integriert werden muss. Bevor das Mehrebenen-Newton Verfahren angewendet werden kann, muss die Zeitintegration durchgeführt werden. Dies wird im folgenden Abschnitt kurz anhand der in (Schittkowski, 2002) dargestellten Vorgehensweise durchgeführt. Mahnken (2000) zeigt dieses Vorgehen in Hinblick auf dessen Anwendung in einem Newton-Raphson Verfahren. In dieser Arbeit soll der Fokus hingegen auf der Anwendung des MLNA und der Lösung des zugehörigen DAE-Systems liegen.

Ausgehend von dem DAE-System (3.54) wird die eingebettete ε -Methode angewendet, um das Gleichungssystem in einem Zuge zeitlich zu diskretisieren. Mit Einführung eines kleinen ε kann das Gleichungssystem (3.54) mit Hilfe von Gleichung (3.55) sowie $\mathbf{y}^T = \{\mathbf{u}^T, \mathbf{q}^T\}$

$$\dot{\mathbf{q}} = \mathbf{r}(t, \mathbf{y}) \quad (5.5)$$

$$\varepsilon \dot{\mathbf{u}} = \mathbf{g}(t, \mathbf{y}) \quad (5.6)$$

geschrieben werden, bzw.

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{y}, \dot{\mathbf{y}}) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{r}(\mathbf{y}, t) - \dot{\mathbf{q}} \\ \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{g}(t, \mathbf{y}) - \dot{\mathbf{u}} \end{array} \right\} = \mathbf{0}. \quad (5.7)$$

Durch umsordieren nach den Zeitableitungen und der Definition

$$\hat{\mathbf{F}}(t, \mathbf{y}) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{r}(t, \mathbf{y}) \\ \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{g}(t, \mathbf{y}) \end{array} \right\} \quad (5.8)$$

kann Gleichung (5.7) als

$$\dot{\mathbf{y}}(t) = \hat{\mathbf{F}}(t, \mathbf{y}(t)) \quad (5.9)$$

formuliert werden. Da die Lösung von den Materialparametern abhängt, gilt

$$\dot{\mathbf{y}}(t, \boldsymbol{\kappa}) = \hat{\mathbf{F}}(t, \mathbf{y}(t, \boldsymbol{\kappa}), \boldsymbol{\kappa}). \quad (5.10)$$

Zur Berechnung der Sensitivitäten muss Gleichung (5.10) nach κ abgeleitet werden und anschließend eine Zeitintegration erfolgen. Umgekehrt ist es auch möglich, die Zeitintegration zuerst durchzuführen und die Ableitung nach κ im Anschluss daran zu berechnen. Dies wird im Folgenden untersucht.

Sensitivität zuerst: Ausgehend von Gleichung (5.10) liefert eine Ableitung nach κ

$$\frac{d}{d\kappa} \dot{\mathbf{y}}(t, \kappa) = \frac{d}{dt} \frac{d\mathbf{y}}{d\kappa} = \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \mathbf{y}} \frac{d\mathbf{y}}{d\kappa} + \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \kappa} \quad (5.11)$$

Für mehr Übersichtlichkeit wird die Definition

$$\frac{d\mathbf{y}}{d\kappa} \equiv \mathbf{w} \in \mathbb{R}^{(n_u+n_q) \times n_\kappa} \quad (5.12)$$

eingeführt, womit Gleichung (5.11) als

$$\dot{\mathbf{w}} = \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{w} + \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \kappa} \quad (5.13)$$

geschrieben werden kann, es handelt sich dabei um ein Differentialgleichungssystem mit mehreren rechten Seiten. Die Zeitintegration erfolgt mit Hilfe von diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahren, was auf die Stufenableitung

$$\dot{\mathbf{W}}_{ni}(\kappa) = \frac{\mathbf{W}_{ni}(\kappa) - \mathbf{S}_{ni}^w}{a_{ii} \Delta t_n} \quad (5.14)$$

führt. Umformuliert erhält man

$$\mathbf{W}_{ni} = \mathbf{S}_{ni}^w + a_{ii} \Delta t_n \dot{\mathbf{W}}_{ni} \quad (5.15)$$

$$= \mathbf{S}_{ni}^w + a_{ii} \Delta t_n \left[\left. \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \mathbf{y}} \right|_{\mathbf{y}=\mathbf{y}_{ni}} \mathbf{w} + \left. \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \kappa} \right|_{\mathbf{y}=\mathbf{y}_{ni}} \right]. \quad (5.16)$$

Die Stufenwerte werden mit einem Exponenten entsprechend ihrer Bedeutung versehen. So treten Startwerte \mathbf{S}_{ni}^w bei der Zeitintegration von \mathbf{w} auf, \mathbf{S}_{ni}^y bei der Integration von \mathbf{y} und so weiter. Daraus kann man schlussfolgern, dass

$$\left[1 - a_{ii} \Delta t_n \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \mathbf{y}} \right] \mathbf{W}_{ni} = \mathbf{S}_{ni}^w + a_{ii} \Delta t_n \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \kappa} \quad (5.17)$$

gilt. Der Zusammenhang der Stufenwerte $\mathbf{S}_{ni}^w \in \mathbb{R}^{(n_u+n_q) \times n_\kappa}$ und $\mathbf{S}_{ni}^y \in \mathbb{R}^{n_u+n_q}$ wird aufgrund der Definition (5.13) durch

$$\mathbf{S}_{ni}^w = \frac{\partial \mathbf{S}_{ni}^y}{\partial \kappa} \quad (5.18)$$

gegeben. Somit kann Gleichung (5.17) als

$$\left[1 - a_{ii} \Delta t_n \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \mathbf{y}} \right] \frac{d \mathbf{Y}_{ni}}{d \boldsymbol{\kappa}} = \frac{\partial \mathbf{S}_{ni}^w}{\partial \boldsymbol{\kappa}} + a_{ii} \Delta t_n \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \quad (5.19)$$

geschrieben werden.

Zeitintegration zuerst: Wird Gleichung (5.10) zuerst zeitlich integriert und anschließend abgeleitet, so ergibt sich folgendes Vorgehen. Die Zeitintegration mit Hilfe von DIRK-Verfahren führt auf

$$\mathbf{Y}_{ni} = \mathbf{S}_{ni}^y + a_{ii} \Delta t_n \hat{\mathbf{F}}(T_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}(\boldsymbol{\kappa}), \boldsymbol{\kappa}). \quad (5.20)$$

Ableiten nach $\boldsymbol{\kappa}$ liefert

$$\frac{d \mathbf{Y}_{ni}}{d \boldsymbol{\kappa}} = \frac{d \mathbf{S}_{ni}^y}{d \boldsymbol{\kappa}} + a_{ii} \Delta t_n \frac{d \hat{\mathbf{F}}(T_{ni}, \mathbf{Y}_{ni}(\boldsymbol{\kappa}), \boldsymbol{\kappa})}{d \boldsymbol{\kappa}} \quad (5.21)$$

$$= \frac{d \mathbf{S}_{ni}^y}{d \boldsymbol{\kappa}} + a_{ii} \Delta t_n \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \mathbf{y}} \bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{Y}_{ni}} \frac{\partial \mathbf{Y}_{ni}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \bigg|_{\mathbf{y}=\mathbf{Y}_{ni}} \right]. \quad (5.22)$$

Nach Umsortieren erhält man wieder Gleichung (5.19) und sämtliche späteren Schritte sind unabhängig von der Reihenfolge der Differentiation identisch. Mit der Definition von \mathbf{y} ergibt sich

$$\mathbf{W}_{ni} = \begin{bmatrix} \frac{d \mathbf{U}_{ni}}{d \boldsymbol{\kappa}} \\ \frac{d \mathbf{Q}_{ni}}{d \boldsymbol{\kappa}} \end{bmatrix}, \quad \in \mathbb{R}^{(n_u+n_q) \times n_{\boldsymbol{\kappa}}}. \quad (5.23)$$

Der an der Stützstelle \mathbf{W}_{ns} berechnete Wert stimmt bei steif-genauen Verfahren mit dem Wert \mathbf{W}_{n+1} überein, d.h.

$$\mathbf{w}_{n+1} = \mathbf{W}_{ns} = \begin{bmatrix} \frac{d \mathbf{U}_{ns}}{d \boldsymbol{\kappa}} \\ \frac{d \mathbf{Q}_{ns}}{d \boldsymbol{\kappa}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{d \mathbf{u}}{d \boldsymbol{\kappa}} \big|_{t=t_{n+1}} \\ \frac{d \mathbf{q}}{d \boldsymbol{\kappa}} \big|_{t=t_{n+1}} \end{bmatrix}. \quad (5.24)$$

Gleichung (5.19) kann als

$$\begin{bmatrix} 1 - a_{ii} \Delta t_n \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{U}_{ni}} \big|_{\mathbf{u}=\mathbf{U}_{ni}} \\ 1 - a_{ii} \Delta t_n \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{q}} \big|_{\mathbf{q}=\mathbf{Q}_{ni}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{d \mathbf{U}_{ni}}{d \boldsymbol{\kappa}} \\ \frac{d \mathbf{Q}_{ni}}{d \boldsymbol{\kappa}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{ni}^u \\ \mathbf{S}_{ni}^q \end{bmatrix} + a_{ii} \Delta t_n \left[\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \right]. \quad (5.25)$$

geschrieben werden. Die Lösung dieses Gleichungssystems liefert die jeweiligen Zeitableitungen für die inneren Variablen sowie die Verschiebungen in der aktuellen Stufe des DIRK-Verfahrens.

5.4 Berechnung der Unsicherheiten

In Gleichung (5.25) wird klar, dass die Sensitivitäten ebenfalls eine Geschichtsabhängigkeit aufweisen und somit in jedem Zeitschritt bereitgestellt werden müssen. Dabei ist nur der vorhergehende Zeitschritt von Bedeutung, weshalb ein Abspeichern aller Werte nicht nötig ist. Im folgenden Abschnitt wird diskutiert, wie die Ableitungen der Verschiebungen \mathbf{U} und inneren Variablen \mathbf{Q} nach den Materialparametern $\boldsymbol{\kappa}$ berechnet werden können.

5.4.1 Beschaffung der notwendigen Ableitungen

Um die Sensitivitäten zu berechnen, werden die Knotenverschiebungen \mathbf{U} insofern interpretiert, dass es die zeitlich diskretisierten³ Verschiebungen auch von den Materialparametern $\boldsymbol{\kappa}$ abhängen, d.h.

$$\mathbf{U} = \hat{\mathbf{U}}(\boldsymbol{\kappa}, t). \quad (5.26)$$

Analog kann man die inneren Variablen \mathbf{Q} im Sinne des Mehrebenen-Newton-Verfahrens als von $\boldsymbol{\kappa}$ abhängig formulieren.

$$\mathbf{Q}(\mathbf{U}) = \hat{\mathbf{Q}}(\hat{\mathbf{U}}(\boldsymbol{\kappa}), \boldsymbol{\kappa}). \quad (5.27)$$

Gleichung (3.43) wird somit zu

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{G}}(\hat{\mathbf{U}}(\boldsymbol{\kappa}), \hat{\mathbf{Q}}(\hat{\mathbf{U}}(\boldsymbol{\kappa}), \boldsymbol{\kappa})) &= \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \left\{ \int_{\Omega^e} \tilde{\mathbf{B}}^{eT} \tilde{\mathbf{h}}^e(\hat{\mathbf{C}}^e(\hat{\mathbf{E}}(\boldsymbol{\kappa})), \hat{\mathbf{Q}}(\hat{\mathbf{U}}(\boldsymbol{\kappa}), \boldsymbol{\kappa}), \boldsymbol{\kappa}) d\Omega^e - \bar{\mathbf{p}}(t) \right\} = \mathbf{0}. \end{aligned} \quad (5.28)$$

Gemäß Gleichung (5.3) benötigt man zur Berechnung der Unsicherheiten die Ableitung $d\hat{\mathbf{U}}/d\boldsymbol{\kappa}$. Dazu bildet man die Ableitung von $\hat{\mathbf{G}}$ nach $\boldsymbol{\kappa}$.

$$\frac{d\hat{\mathbf{G}}}{d\boldsymbol{\kappa}} = \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} \right] \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{d\boldsymbol{\kappa}} + \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\boldsymbol{\kappa}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \right] = \mathbf{0} \quad (5.29)$$

Dabei stellt der Ausdruck

$$\mathbf{K}_T = \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} \right] = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \mathbf{k}^e \mathbf{z}^e \quad (5.30)$$

³Der Index *ni* wird zur besseren Übersicht erneut fortgelassen.

die tangentielle Steifigkeitsmatrix des Mehrebenen-Newton Verfahrens dar. Auf lokaler Ebene ist die Elementsteifigkeitsmatrix

$$\mathbf{k}^e = \int_{\Omega^e} \tilde{\mathbf{B}}^{eT} \tilde{\mathbf{T}}^e d\Omega^e + \int_{\Omega^e} \tilde{\mathbf{B}}^{eT} 2 \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{h}}^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}} + \frac{\partial \tilde{\mathbf{h}}^e}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \hat{\mathbf{C}}} \right] \tilde{\mathbf{B}}^e d\Omega^e \quad (5.31)$$

definiert. Dabei wird ausgenutzt, dass

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{C}}}{\partial \hat{\mathbf{E}}} = 2\mathbf{1} \quad \text{sowie} \quad \frac{\partial \hat{\mathbf{E}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} = \mathbf{F}_{23}^{eT} \mathbf{B}^e \quad (5.32)$$

gilt. Bei dem Term

$$\tilde{\mathbf{C}}_L^e = 2 \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{h}}^e}{\partial \hat{\mathbf{C}}} + \frac{\partial \tilde{\mathbf{h}}^e}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \hat{\mathbf{C}}} \right] \quad (5.33)$$

handelt es sich um den Tangentenoperator, der sich alternativ in räumlicher Darstellung als

$$\mathbf{C}_L^e = \frac{1}{J^e} \mathbf{F}_{23}^e \tilde{\mathbf{C}}_L^e \mathbf{F}_{23}^{eT} \quad (5.34)$$

schreiben lässt, vergleiche (Hartmann, 2003). Man erkennt, dass die tangentielle Steifigkeitsmatrix \mathbf{K}_T durch die Assemblierung des lokalen Tangentenoperators $\tilde{\mathbf{C}}_L^e$ aufgebaut wird. Da dieser schon in der Materialroutine bereitgestellt wird, wird nur noch der Anteil

$$\mathbf{R}_\kappa = \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \kappa} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \kappa} \right] \quad (5.35)$$

benötigt, um das Gleichungssystem mit mehreren rechten Seiten

$$\mathbf{K}_T \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{d\kappa} = -\mathbf{R}_\kappa \quad (5.36)$$

zu lösen. Begibt man sich nun auf die Elementebene, so kann man zeigen, dass

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \kappa} = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \int_{\Omega^e} \tilde{\mathbf{B}}^{eT} \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{h}}^e}{\partial \kappa} \right] d\Omega^e \quad (5.37)$$

$$\left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\kappa} \right] = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \int_{\Omega^e} \tilde{\mathbf{B}}^{eT} \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{h}}^e}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\kappa} \right] d\Omega^e \quad (5.38)$$

gilt. Der Term $\partial \tilde{\mathbf{h}}^e / \partial \kappa$ muss zusätzlich berechnet werden, was direkt in der Materialroutine geschehen kann. Die inneren Variablen werden an jedem Gauss-Punkt mit Hilfe der

Gauss-Integration berechnet, daher wird das Integral zu einer Summe über alle Gauss-Punkte.

$$\left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\boldsymbol{\kappa}} \right] = \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{l=1}^{n_{GP}} w_l \mathbf{z}^{eT} \tilde{\mathbf{B}}^{eT} \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{h}}^e}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\boldsymbol{\kappa}} \right] \quad (5.39)$$

Die Zuordnung der inneren Variablen erfolgt nach

$$\hat{\mathbf{Q}}^e(\boldsymbol{\xi}_l) = \hat{\mathbf{Q}}_l^e = \mathbf{z}_{ql}^e \hat{\mathbf{Q}}, \quad \text{bzw.} \quad \hat{\mathbf{Q}} = \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{l=1}^{n_{GP}} w_l \mathbf{z}_{ql}^{eT} \hat{\mathbf{Q}}_l^e. \quad (5.40)$$

Dabei sind $\mathbf{z}_{ql}^e \in \mathbb{R}^{n_q \times n_Q}$ die Zuordnungsmatrizen der inneren Variablen, welche die n_q inneren Variablen am jeweiligen Gauss-Punkt l des Elements e den n_Q globalen inneren Variablen zuordnen. Damit kann man schreiben

$$\left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\boldsymbol{\kappa}} \right] = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \sum_{l=1}^{n_{GP}} w_l \tilde{\mathbf{B}}^{eT} \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{h}}^e}{\partial \hat{\mathbf{Q}}_l^e} \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}_l^e}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}_l^e} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}_l^e}{d\boldsymbol{\kappa}} \right] \quad (5.41)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \sum_{l=1}^{n_{GP}} w_l \tilde{\mathbf{B}}^{eT} \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{h}}^e}{\partial \hat{\mathbf{Q}}_l^e} \mathbf{z}_{ql}^e \mathbf{z}_{ql}^{eT} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}_l^e}{d\boldsymbol{\kappa}} \right] \\ &= \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \sum_{l=1}^{n_{GP}} w_l \tilde{\mathbf{B}}^{eT} \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{h}}^e}{\partial \hat{\mathbf{Q}}_l^e} \mathbf{1}_{n_q \times n_q} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}_l^e}{d\boldsymbol{\kappa}} \right] \\ &= \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \sum_{l=1}^{n_{GP}} w_l \tilde{\mathbf{B}}^{eT} \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{h}}^e}{\partial \hat{\mathbf{Q}}_l^e} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}_l^e}{d\boldsymbol{\kappa}} \right]. \end{aligned} \quad (5.42)$$

Der Anteil $\partial \tilde{\mathbf{h}}^e / \partial \hat{\mathbf{Q}}_l^e$ wird von der Materialroutine bereits berechnet und kann daher bereitgestellt werden. $d\hat{\mathbf{Q}}_l^e / d\boldsymbol{\kappa}$ ist vorerst unbekannt, aber kann im lokalen Schritt des MLNA beschafft werden. Die Ableitung von $\hat{\mathbf{L}}(\hat{\mathbf{U}}(\boldsymbol{\kappa}), \hat{\mathbf{Q}}(\hat{\mathbf{U}}(\boldsymbol{\kappa}), \boldsymbol{\kappa}), \boldsymbol{\kappa})$ nach $\boldsymbol{\kappa}$ liefert an jedem Gauss-Punkt⁴

$$\frac{d\hat{\mathbf{L}}}{d\boldsymbol{\kappa}} = \underbrace{\left[\frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} \right]}_{(*)} \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{d\boldsymbol{\kappa}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{\partial \hat{\mathbf{Q}}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} = \mathbf{0}. \quad (5.43)$$

Im lokalen Iterationsschritt des Mehrebenen-Newton Verfahrens wird bereits das Gleichungssystem

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\hat{\mathbf{U}}} = - \frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} \quad (5.44)$$

⁴Die inneren Variablen liegen Gauss-Punktweise entkoppelt vor, was das Vorgehen rechtfertigt.

gelöst, um $d\hat{\mathbf{Q}}/d\hat{\mathbf{U}}$ zu erhalten, daher ist lokal (*) identisch zu Null und fällt heraus. Übrig bleibt das Gleichungssystem

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\boldsymbol{\kappa}} = -\frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial \boldsymbol{\kappa}}, \quad (5.45)$$

welches zusätzlich im lokalen Schritt berechnet werden muss. Der Anteil $\partial \hat{\mathbf{L}}/\partial \hat{\mathbf{Q}}$ ist bekannt, da er schon für die Lösung des Gleichungssystems (5.44) genutzt wird.

Durch Variation der Komponenten von $\boldsymbol{\kappa}$ um ein kleines $\Delta\boldsymbol{\kappa}$ beschafft man sich über numerische Differentiation, siehe Abschnitt 5.2. Dies ist die einfachste Möglichkeit, um die Ableitungen an dieser Stelle zu berechnen. Da die Methode der Vorwärtsdifferenzen aber mit einigen Nachteilen behaftet ist (siehe z.B. (Haftka, 1985) und (Schittkowski, 2002)), wäre es von Vorteil, im lokalen Iterationsschritt die Ableitungen direkt in der Materialroutine zu berechnen. Mahnen (2000) zeigt dies für das Newton-Raphson-Verfahren für ein thermoelastisches Modell, vergleiche auch (Kleiber et al., 1997). In dieser Arbeit wird die Methodik bei Anwendung auf das Mehrebenen-Newton-Verfahren vorgestellt, eine Implementation findet nur auf globaler Ebene mit Hilfe von numerischer Differentiation statt.

Durch Auswertung des Gleichungssystems (5.45) erhält man lokal $d\hat{\mathbf{Q}}_l^e/d\boldsymbol{\kappa}$ und kann die rechte Seite $\mathbf{R}_{\boldsymbol{\kappa}}$ entsprechend von Gleichung (5.42) und (5.42) assemblieren. Damit lässt sich die Ableitung $\partial \hat{\mathbf{U}}/\partial \boldsymbol{\kappa}$ bereitstellen. Zudem ist es ausreichend, die Ableitungen nach $\boldsymbol{\kappa}$ erst nach Erreichen des Konvergenzkriteriums (d.h. im Gleichgewicht) durchzuführen. Dies hat den Vorteil, dass man die zusätzlich zu lösenden Gleichungssysteme nicht unnötig zu häufig berechnet. Es ist zu erwarten, dass ein solches Vorgehen mit merklichen Rechenzeitgewinnen gegenüber einer global implementierten Methodik mit finiten Differenzen einhergeht. Zusammengefasst wird das Vorgehen nochmals im Zuge des Mehrebenen-Newton Verfahrens in Tabelle 5.1 dargestellt.

Tabelle 5.1: Mehrebenen-Newton-Verfahren zum Zeitpunkt T_{ni}

gegeben: $\hat{\mathbf{U}}_{ni}^{(0)} = \hat{\mathbf{U}}_{ni}$, $\hat{\mathbf{Q}}_{ni}^{(0)} = \hat{\mathbf{Q}}_{ni}$, Δt_{ni} , T_{ni}	
wiederhole $m = 0, \dots$	
<i>Lokale Ebene</i> (gegeben: $\hat{\mathbf{U}}_{ni}^{(m)}$, Argumentvektor $\mathbf{z} \equiv (\hat{\mathbf{U}}_{ni}^{(m)}, \hat{\mathbf{Q}}_{ni}^{(m+1)})$) Lokaler Integrationsschritt $\hat{\mathbf{L}}(\hat{\mathbf{U}}_{ni}^{(m)}, \hat{\mathbf{Q}}_{ni}^{(m+1)}) = \mathbf{0} \rightsquigarrow \hat{\mathbf{Q}}_{ni}^{(m+1)}$ konsistente Linearisierung $\left[\frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \right]_{\mathbf{z}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\hat{\mathbf{U}}} = - \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} \right]_{\mathbf{z}} \rightsquigarrow \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\hat{\mathbf{U}}} \Big _{\mathbf{z}}$	
<i>Globale Ebene</i> Lösung des linearen Gleichungssystems $\left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} \Big _{\mathbf{z}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \Big _{\mathbf{z}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\hat{\mathbf{U}}} \Big _{\mathbf{z}} \right] \Delta \hat{\mathbf{U}}_{ni} = -\hat{\mathbf{G}}(\mathbf{z}) \rightsquigarrow \Delta \hat{\mathbf{U}}_{ni}$ Update der globalen Variablen $\mathbf{U}_{ni}^{(m+1)} \leftarrow \hat{\mathbf{U}}_{ni}^{(m)} + \Delta \hat{\mathbf{U}}_{ni} \rightsquigarrow \hat{\mathbf{U}}_{ni}^{(m+1)}$	
bis Konvergenzkriterium erfüllt	
<i>Berechnung der Sensitivitäten</i>	
(Argumentvektor $\mathbf{z} \equiv (\hat{\mathbf{U}}_{ni}, \hat{\mathbf{Q}}_{ni})$) $\left[\frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \right]_{\mathbf{z}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\kappa} = - \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial \kappa} \right]_{\mathbf{z}} \rightsquigarrow \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\kappa} \Big _{\mathbf{z}}$ $\left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} \Big _{\mathbf{z}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \Big _{\mathbf{z}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\hat{\mathbf{U}}} \Big _{\mathbf{z}} \right] \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{d\kappa} = - \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \kappa} \Big _{\mathbf{z}} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{Q}}} \Big _{\mathbf{z}} \frac{d\hat{\mathbf{Q}}}{d\kappa} \Big _{\mathbf{z}} \right] \rightsquigarrow \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{d\kappa} \Big _{\mathbf{z}}$	

5.4.2 Berechnung der Unsicherheiten in den Verschiebungen

Da $\hat{\mathbf{U}}(\kappa)$ ausschließlich von κ abhängt (der Ort \mathbf{X} und die Zeit t sind unabhängig von den Materialparametern κ), entspricht die totale Ableitung der partiellen Ableitung und man kann die Kovarianzmatrix der Verschiebungen hinsichtlich der Materialparameter berechnen, es gilt:

$$\check{\mathbf{C}}_{\hat{\mathbf{U}}} = \left[\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{d\kappa} \right] \check{\mathbf{C}}_{\kappa} \left[\frac{d\hat{\mathbf{U}}}{d\kappa} \right]^T. \quad (5.46)$$

Für Materialparameter $\kappa = \{\kappa_1, \dots, \kappa_m\}$ hat die Kovarianzmatrix die folgende Form:

$$\check{\mathbf{C}}_{\kappa} = \begin{bmatrix} s_{\kappa_1}^2 & \dots & \check{c}_{\kappa_1 \kappa_n \kappa} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \check{c}_{\kappa_n \kappa \kappa_1} & \dots & s_{\kappa_n \kappa}^2 \end{bmatrix}, \quad \check{\mathbf{C}}_{\hat{\mathbf{U}}} = \begin{bmatrix} s_{\hat{u}_1}^2 & \dots & \check{c}_{\hat{u}_1 \hat{u}_{n_u}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \check{c}_{\hat{u}_{n_u} \hat{u}_1} & \dots & s_{\hat{u}_{n_u}}^2 \end{bmatrix} \quad (5.47)$$

Die Varianzen $s_{\kappa_i}^2 = \check{c}_{\kappa_i \kappa_i}$ sind dabei die Unsicherheiten der Materialparameter κ . Diese können in einem Vektor $\mathbf{s}_{\hat{\mathbf{U}}}^T = \{s_{u_1}, s_{u_2}, \dots, s_{u_{n_u}}\}$ angeordnet werden. Dieser enthält dann die zum Verschiebungsvektor $\hat{\mathbf{U}}^T = \{\hat{U}_1, \dots, \hat{U}_{n_u}\}$ passenden Unsicherheiten.

5.4.3 Berechnung der Unsicherheiten in den Spannungen

Zusätzlich zur Berechnung der Unsicherheiten in den Verschiebungen ist auch eine Charakterisierung der Spannungen von Interesse. Bei der Berechnung der Unsicherheiten des Spannungsfelds wird durch numerische Differentiation der Term $\partial \tilde{\mathbf{h}}^e / \partial \kappa$ an jedem Gauss-Punkt gebildet. Dieser muss nur noch assembliert werden. Die Spannungen selbst werden zu dem Vektor $\tilde{\mathbf{T}}$ assembliert in der Form

$$\tilde{\mathbf{T}} = \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{l=1}^{n_{GP}} \mathbf{Z}_{tl}^{eT} \tilde{\mathbf{T}}_l^e, \quad (5.48)$$

mit

$$\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\mathbf{h}}(\mathbf{E}(\kappa), \mathbf{q}(\kappa), \kappa), \quad (5.49)$$

so dass analog die Assemblierung der Ableitungen erfolgt nach

$$\frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}}{\partial \kappa} = \sum_{e=1}^{n_e} \sum_{l=1}^{n_{GP}} \mathbf{Z}_{tl}^{eT} \frac{\partial \tilde{\mathbf{h}}_l^e}{\partial \kappa}. \quad (5.50)$$

Die Zuordnungsmatrix \mathbf{Z}_{tl}^e sorgt dabei formal für die Assemblierung entsprechend aller Spannungen an jedem Punkt ξ_l der Gauss-Integration. In Anlehnung an den vorhergehenden Abschnitt berechnen sich die Unsicherheiten der Spannungen zu

$$\check{\mathbf{C}}_{\tilde{\mathbf{T}}} = \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}}{\partial \kappa} \right]^T \check{\mathbf{C}}_{\kappa} \left[\frac{\partial \tilde{\mathbf{T}}}{\partial \kappa} \right]. \quad (5.51)$$

Analog dazu gilt für die Cauchy-Spannungen

$$\check{\mathbf{C}}_{\mathbf{T}} = \left[\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \kappa} \right]^T \check{\mathbf{C}}_{\kappa} \left[\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \kappa} \right]. \quad (5.52)$$

Es wird klar, dass die in Gleichung (5.50) zusätzlich zur Berechnung von $\tilde{\mathbf{T}}_l^e$ noch deren Ableitungen nach κ berechnet werden müssen.

5.4.4 Beispiel: Lineare Elastizität

Als einfaches Beispiel zur Berechnung der Unsicherheiten in den Verschiebungen dient die lineare eindimensionale Elastizität in Form des linearen Zug-Druck-Stabs für kleine Deformationen. Dabei existieren keinerlei innere Variablen, weshalb sich die Gleichge-

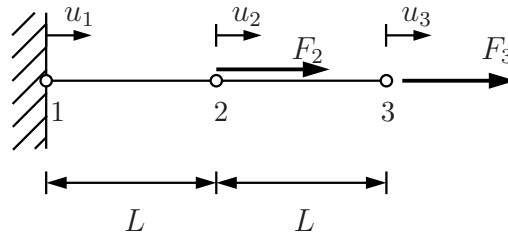


Abbildung 5.3: Linearer Zug-Druck Stab

wichtsbedingung reduziert auf

$$\mathbf{g}(\mathbf{u}(\boldsymbol{\kappa}), \boldsymbol{\kappa}) = \mathbf{K}(\boldsymbol{\kappa})\mathbf{u}(\boldsymbol{\kappa}) - \mathbf{F} = \mathbf{0} \quad (5.53)$$

mit der globalen Steifigkeitsmatrix \mathbf{K} , dem Verschiebungsfeld $\mathbf{u}(\boldsymbol{\kappa})$ und der angreifenden Kraft \mathbf{F} . Die Elementsteifigkeitsmatrix hat die Form

$$\mathbf{k}^e = \frac{EA}{L} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}. \quad (5.54)$$

und assembliert sich gemäß Gleichung (5.30) zu

$$\mathbf{K} = \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{Z}^e \mathbf{T}^e \mathbf{k}^e \mathbf{Z}^e = \frac{EA}{L} \begin{bmatrix} 2 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.55)$$

Die Geometrieparameter L (Länge des Stabs) und A (Querschnittfläche) treten dabei als Konstanten auf. Der Elastizitätsmodul E ist in diesem Fall der einzige Materialparameter, d.h. $\boldsymbol{\kappa} = \{E\}$. Der Vektor aller unbekannten Verschiebungen ist durch $\mathbf{u}^T = \{u_2, u_3\}$ gegeben. Im Fall der Elastizität reduziert sich Gleichung (??) daher auf

$$\frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \mathbf{u}} \frac{d\mathbf{u}}{d\boldsymbol{\kappa}} = -\frac{\partial \mathbf{g}}{\partial \boldsymbol{\kappa}}. \quad (5.56)$$

Es gilt folglich

$$\mathbf{K} \frac{d\mathbf{u}}{d\boldsymbol{\kappa}} = -\frac{1}{E} \mathbf{K} \mathbf{u} \quad (5.57)$$

$$\frac{d\mathbf{u}}{d\boldsymbol{\kappa}} = -\frac{1}{E} \mathbf{u} = -\frac{1}{E} \begin{Bmatrix} u_2 \\ u_3 \end{Bmatrix}. \quad (5.58)$$

Für die allgemein als $\check{\mathbf{C}}_{\mathbf{u}}$ formulierten Unsicherheiten in den Verschiebungen gilt:

$$\check{\mathbf{C}}_{\mathbf{u}} = \begin{bmatrix} \sigma_{u_2}^2 & \sigma_{u_2}\sigma_{u_3} \\ \sigma_{u_3}\sigma_{u_2} & \sigma_{u_3}^2 \end{bmatrix} = \left\{ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \kappa} \right\}^T \check{\mathbf{C}}_{\kappa} \left\{ \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \kappa} \right\} \quad (5.59)$$

$$= \frac{1}{E^2} \{u_2, u_3\} \sigma_E^2 \begin{Bmatrix} u_2 \\ u_3 \end{Bmatrix} \quad (5.60)$$

$$= \frac{\sigma_E^2}{E^2} \begin{bmatrix} u_2^2 & u_2 u_3 \\ u_2 u_3 & u_3^2 \end{bmatrix} \quad (5.61)$$

Erwartungsgemäß gilt daher für die Unsicherheiten $\Delta \mathbf{u}$

$$\Delta u_2 = \sigma_{u_2} u_2 = \frac{\Delta E}{E} u_2, \quad (5.62)$$

$$\Delta u_3 = \sigma_{u_3} u_3 = \frac{\Delta E}{E} u_3. \quad (5.63)$$

Dabei zeigt sich, dass im betrachteten Beispiel die Unsicherheiten der einzelnen Knotenverschiebungen nicht voneinander abhängen. Sie hängen vielmehr nur von der Knotenverschiebung selbst und den Unsicherheiten des Parameters E ab.

5.4.5 Verschiebungsgesteuerte Prozesse

Die bisher betrachtete Formulierung liefert zunächst keine Informationen über Lagerreaktionen in Finite-Elemente Berechnungen. Mit Hilfe der von Hartmann et al. (2008) vorgestellten Methodik können diese ohne weiteren Aufwand gewonnen werden. Zusätzlich können auch die Sensitivitäten für dieses Problem berechnet werden.

Der Verschiebungsvektor $\mathbf{u}_a(t)$ aller Verschiebungen wird bei der Raumdiskretisierung nach Gleichung (3.28) in bekannte $\bar{\mathbf{u}}(t)$ und unbekannte Verschiebungen $\hat{\mathbf{u}}(t)$ zerlegt

$$\mathbf{u}_a(t) = \begin{Bmatrix} \mathbf{u}(t) \\ \bar{\mathbf{u}}(t) \end{Bmatrix}. \quad (5.64)$$

Die vorgegebenen Verschiebungen $\bar{\mathbf{u}}(t)$ sind bekannt, weil sie vorgegebene Randbedingungen enthalten, die vorgegeben sind. An dieser Stelle müssen zugehörige Reaktionskräfte auftreten.

Nun nimmt man an, dass alle Knotenverschiebungen $\mathbf{u}_a(t)$ unbekannt seien, d.h. man ersetzt $\bar{\mathbf{u}}(t)$ durch unbekannte Verschiebungen $\hat{\mathbf{u}}(t)$, vgl. Gleichung (5.64). Um die Reaktionskräfte auszurechnen wird eine äußere Zwangsbedingung

$$\mathbf{C}_u(t, \mathbf{u}_a(t)) = \mathbf{M}^T \mathbf{u}_a(t) - \bar{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{0}, \quad (5.65)$$

$$\hat{\mathbf{u}}(t) - \bar{\mathbf{u}}(t) = \mathbf{0} \quad (5.66)$$

eingefügt, die mit Hilfe der Zuordnungsmatrix

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_{n_u \times n_p} \\ \mathbf{1}_{n_p} \end{bmatrix} \quad (5.67)$$

für die Einhaltung der geometrischen Zwänge sorgt. Mit Hilfe der Methode der Lagrange-Multiplikatoren wird die Gleichgewichtsbedingung angepasst, d.h.

$$\mathbf{g}_a(t, \mathbf{u}_a(t), \mathbf{q}(t)) + \mathbf{M}\boldsymbol{\lambda}(t) = \mathbf{0} \quad (5.68)$$

Sie zeigt nun eine Abhängigkeit vom gesamten Verschiebungsvektor $\mathbf{u}_a(t)$ sowie vom Lagrange-Multiplikator $\boldsymbol{\lambda}(t)$ und zerlegt sich analog zu den Knotenverschiebungen \mathbf{u}_a in unbekannte und bekannte Anteile

$$\mathbf{g}_a(T_{ni}, \mathbf{u}_{ani}, \mathbf{q}_{ani}) = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{g}(T_{ni}, \mathbf{u}_{ani}, \mathbf{q}_{ani}) \\ \bar{\mathbf{g}}(T_{ni}, \mathbf{u}_{ani}, \mathbf{q}_{ani}) \end{array} \right\} = \quad (5.69)$$

$$= \left\{ \begin{array}{l} \sum_{e=1}^{n_e} \mathbf{z}^{eT} \left\{ \sum_{l=1}^{n_{GP}} w_l \mathbf{B}_l^{eT} \mathbf{h}(\mathbf{E}_l^e(t), \mathbf{q}_l^e(t)) \det \mathbf{J}_l^e \right\} - \bar{\mathbf{p}}(t) \\ \sum_{e=1}^{n_e} \bar{\mathbf{z}}^{eT} \left\{ \sum_{l=1}^{n_{GP}} w_l \mathbf{B}_l^{eT} \mathbf{h}(\mathbf{E}_l^e(t), \mathbf{q}_l^e(t)) \det \mathbf{J}_l^e \right\} \end{array} \right\}. \quad (5.70)$$

Dementsprechend modifizieren sich auch die Evolutionsgleichungen zu

$$\dot{\mathbf{q}}(t) - \mathbf{r}(\mathbf{u}_a(t), \mathbf{q}(t)) = \mathbf{0} \quad (5.71)$$

und das zu lösende DAE-System erhält die Struktur

$$\mathbf{F}(t, \mathbf{y}(t), \dot{\mathbf{y}}(t)) = \left\{ \begin{array}{l} \hat{\mathbf{g}}_a(t, \mathbf{u}_a(t), \boldsymbol{\lambda}(t), \mathbf{q}(t)) \\ \mathbf{C}_u(t, \mathbf{u}_a(t)) \\ \dot{\mathbf{q}}(t) - \mathbf{r}(\mathbf{u}_a(t), \mathbf{q}(t)) \end{array} \right\} = \mathbf{0}, \quad \mathbf{F} \in \mathbb{R}^{n_u + 2n_p + n_Q}. \quad (5.72)$$

Im Vektor

$$\mathbf{y} = \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{u}_a \\ \boldsymbol{\lambda} \\ \mathbf{q} \end{array} \right\}, \quad \mathbf{u}_a \in \mathbb{R}^{n_u + n_p}, \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^{n_p}, \mathbf{q} \in \mathbb{R}^{n_Q} \quad (5.73)$$

sind die unbekannten Größen zusammengefasst.

Nach der Zeitdiskretisierung im Sinne der Runge-Kutta Verfahren erhält man (nach Anwendung des Satzes über implizite Funktionen)

$$\mathbf{F}_{ni}(\mathbf{Y}_{ni}) = \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\mathbf{G}}_{ni}(\mathbf{U}_{ani}, \boldsymbol{\lambda}, \mathbf{Q}_{ni}) \\ \mathbf{L}_{ni}(\mathbf{U}_{ani}, \mathbf{Q}_{ni}) \end{array} \right\} = \mathbf{0} \quad (5.74)$$

mit

$$\tilde{\mathbf{G}}_{ni}(\mathbf{U}_{ani}, \lambda, \mathbf{Q}_{ni}) = \begin{Bmatrix} \hat{\mathbf{G}}_{ani}(\mathbf{U}_{ani}, \lambda_{ni}, \mathbf{Q}_{ni}) \\ \mathbf{C}_{uni}(\mathbf{U}_{ani}) \end{Bmatrix} \quad (5.75)$$

und

$$\mathbf{L}_{ni}(\mathbf{U}_{ani}, \mathbf{Q}_{ni}) = \frac{\mathbf{Q}_{ni} - \mathbf{S}_{ni}^q}{\Delta t_n a_{ii}} - \mathbf{r}(\mathbf{U}_{ani}, \mathbf{Q}_{ni}(\mathbf{U}_{ani})). \quad (5.76)$$

Um die Lesbarkeit zu erhöhen, werden im Folgenden wieder die Indizes der Zeitintegration ni unterdrückt. Das zu untersuchende Gleichungssystem hat damit die Form

$$\mathbf{F}(\mathbf{Y}) = \begin{Bmatrix} \hat{\mathbf{G}}_a(\mathbf{U}_a, \lambda, \mathbf{Q}) \\ \mathbf{C}_u(\mathbf{U}_a) \\ \mathbf{L}(\mathbf{U}_a, \mathbf{Q}) \end{Bmatrix} = \mathbf{0}. \quad (5.77)$$

Interpretiert man das System (5.77) insofern, dass die gesuchten Größen neben der Zeit ebenfalls von den Materialparametern κ abhängen, so kann man formal die Ableitung von \mathbf{F} nach κ bilden und erhält mit

$$\frac{d\mathbf{F}}{d\kappa} = \mathbf{0} \quad \rightsquigarrow \quad \frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \mathbf{Y}} \frac{d\mathbf{Y}}{d\kappa} = -\frac{\partial \mathbf{F}}{\partial \kappa} \quad (5.78)$$

das Gleichungssystem

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \mathbf{U}_a} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \mathbf{Q}} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{U}_a} & \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \lambda} & \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \mathbf{Q}} \\ \frac{\partial \mathbf{C}_u}{\partial \mathbf{U}_a} & \frac{\partial \mathbf{C}_u}{\partial \lambda} & \frac{\partial \mathbf{C}_u}{\partial \mathbf{Q}} \\ \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}_a} + \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{U}_a} & \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \lambda} & \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{d\mathbf{U}_a}{d\kappa} \\ \frac{d\lambda}{d\kappa} \\ \frac{d\mathbf{Q}}{d\kappa} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \kappa} \\ \frac{\partial \mathbf{C}_u}{\partial \kappa} \\ \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \kappa} \end{bmatrix}. \quad (5.79)$$

Mit den Ableitungen $\partial \mathbf{C}_u / \partial \mathbf{U}_a = \mathbf{M}^T$ und $\partial \hat{\mathbf{G}}_a / \partial \lambda = \mathbf{M}$ sowie der Erkenntnis, dass die Ableitungen $\partial \mathbf{C}_u / \partial \lambda$, $\partial \mathbf{C}_u / \partial \mathbf{Q}$ sowie $\partial \mathbf{L} / \partial \lambda$ identisch $\mathbf{0}$ sind. Da \mathbf{C}_u nicht explizit von κ abhängt gilt ebenfalls $\partial \mathbf{C}_u / \partial \kappa = \mathbf{0}$. Damit reduziert sich das Gleichungssystem zu

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \mathbf{U}_a} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \mathbf{Q}} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{U}_a} & \mathbf{M} & \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \mathbf{Q}} \\ \mathbf{M}^T & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}_a} + \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{U}_a} & \mathbf{0} & \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{d\mathbf{U}_a}{d\kappa} \\ \frac{d\lambda}{d\kappa} \\ \frac{d\mathbf{Q}}{d\kappa} \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \kappa} \\ \mathbf{0} \\ \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \kappa} \end{bmatrix}. \quad (5.80)$$

Schreibt man das zugrundeliegende Gleichungssystem einzeln auf, so erhält man

$$\left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \mathbf{U}_a} + \frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \mathbf{Q}} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{U}_a} \right] \frac{d\mathbf{U}_a}{d\kappa} + \mathbf{M} \frac{d\lambda}{d\kappa} = - \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{G}}_a}{\partial \kappa} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\kappa} \right] \quad (5.81)$$

$$\mathbf{M}^T \frac{d\mathbf{U}_a}{d\kappa} = \mathbf{0} \quad (5.82)$$

$$\left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}_a} + \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{U}_a} \right] \frac{d\mathbf{U}_a}{d\kappa} + \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\kappa} = - \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \kappa}. \quad (5.83)$$

Gleichung (5.82) liefert dabei keine neuen Erkenntnisse, aber bestätigt die Aussage, dass die Zwangsbedingung (5.65) erfüllt und unabhängig von κ ist

$$\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{d\mathbf{U}}{d\kappa} \\ \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{d\kappa} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{d\kappa} \end{bmatrix} = \mathbf{0}. \quad (5.84)$$

Für den ersten Term in Gleichung (5.83) gilt

$$\left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}_a} + \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{U}_a} \right] = \mathbf{0}, \quad (5.85)$$

da bei der Bestimmung von $d\mathbf{Q}/d\mathbf{U}$ während der konsistenten Linearisierung auf lokaler Ebene des Mehrebenen-Newton Verfahrens $d\mathbf{Q}/d\mathbf{U}$ bestimmt wird, so dass

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} = - \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{U}} \quad (5.86)$$

gilt. Damit reduziert sich Gleichung (5.83) zu

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\kappa} = - \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \kappa}. \quad (5.87)$$

Mit Erinnerung an die Zerlegung von \mathbf{U}_a und $\hat{\mathbf{G}}_a$

$$\mathbf{U}_a = \begin{Bmatrix} \mathbf{U} \\ \hat{\mathbf{U}} \end{Bmatrix}, \mathbf{G}_a = \begin{Bmatrix} \mathbf{G} \\ \bar{\mathbf{G}} \end{Bmatrix} \quad (5.88)$$

kann man Gleichung (5.81) wiederum schreiben als

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{U}} & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} \\ \frac{\partial \bar{\mathbf{G}}}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \bar{\mathbf{G}}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \mathbf{U}} & \frac{\partial \bar{\mathbf{G}}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} + \frac{\partial \bar{\mathbf{G}}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{\partial \mathbf{Q}}{\partial \hat{\mathbf{U}}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{d\mathbf{U}}{d\kappa} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{1} \end{bmatrix} \frac{d\lambda}{d\kappa} = - \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \kappa} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\kappa} \\ \frac{\partial \bar{\mathbf{G}}}{\partial \kappa} + \frac{\partial \bar{\mathbf{G}}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\kappa} \end{bmatrix}. \quad (5.89)$$

Dabei wurde berücksichtigt, dass aufgrund der κ -Unabhängigkeit der vorgegebenen Knotenverschiebungen $d\bar{\mathbf{U}}/d\kappa = \mathbf{0}$ gilt. Für die erste der beiden resultierenden Gleichungen gilt daher

$$\left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} \right] \frac{d\mathbf{U}}{d\kappa} = - \left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \kappa} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\kappa} \right]. \quad (5.90)$$

Gleichung (5.90) entspricht dabei genau der Problemstellung, welche in Gleichung (5.36) schon gezeigt wurde.

In (Hartmann et al., 2008) wird gezeigt, dass

$$\lambda = -\bar{\mathbf{G}}(\mathbf{U}_a, \mathbf{Q}). \quad (5.91)$$

die Reaktionskräfte des Systems darstellen, d.h. $\mathbf{p} = -\lambda$. Interessant ist an dieser Stelle die Feststellung, dass auf diese Weise ebenfalls die Ableitungen und somit die Unsicherheiten der Reaktionskräfte berechnet werden können. Deren Berechnung folgt direkt aus

$$\frac{d\lambda}{d\kappa} = - \left[\frac{\partial \bar{\mathbf{G}}}{\partial \kappa} + \frac{\partial \bar{\mathbf{G}}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\kappa} \right] - \left[\frac{\partial \bar{\mathbf{G}}}{\partial \mathbf{U}} + \frac{\partial \bar{\mathbf{G}}}{\partial \mathbf{Q}} \frac{d\mathbf{Q}}{d\mathbf{U}} \right] \frac{d\mathbf{U}}{d\kappa}. \quad (5.92)$$

5.5 Anmerkung zum zusätzlichen Aufwand

Die Beschaffung der für die Sensitivitätsanalyse notwendigen Ableitungen ist vergleichsweise teuer. Bei einer globalen Implementierung kann man davon ausgehen, dass bei n Materialparametern $\kappa = \{\kappa_1, \dots, \kappa_n\}$ der notwendige Aufwand auf das $(n+1)$ -fache ansteigt. Schließlich muss für jeden Parameter, der eine Unsicherheit $\Delta\kappa_i$, $i = 1, \dots, n$, unterliegt, die Berechnung neu durchgeführt werden.

Stellt man sich auf den Standpunkt der praktischen Bedeutung der Materialparameter, so kann man überlegen, ob nicht eine Abschätzung der oberen und unteren Grenzen sinnvoller und effizienter wäre. Dabei stellt sich heraus, dass dies nur für einen zu variierenden Materialparameter der Fall ist, da es sich um eine Variation mit Wiederholung handelt. Ein Beispiel soll dies verdeutlichen.

Für $n = 3$ haben die drei Parameter $\kappa_1, \kappa_2, \kappa_3$ jeweils durch ihre Unsicherheiten eine obere und untere Grenze. Kennzeichnet man diese Grenzen durch die Exponenten u und o, dann besitzt die Variation des i -ten Parameters κ_i zwei Zustände, κ_i^o und κ_i^u .

Alle Kombinationen, die mit drei Parametern untersucht werden müssen, kann man wie folgt darstellen:

$$\begin{array}{ccc}
 \kappa_1^u & \kappa_2^u & \kappa_3^u \\
 \kappa_1^o & \kappa_2^u & \kappa_3^u \\
 \kappa_1^u & \kappa_2^o & \kappa_3^u \\
 \kappa_1^o & \kappa_2^o & \kappa_3^u \\
 \kappa_1^u & \kappa_2^u & \kappa_3^o \\
 \kappa_1^o & \kappa_2^u & \kappa_3^o \\
 \kappa_1^u & \kappa_2^o & \kappa_3^o \\
 \kappa_1^o & \kappa_2^o & \kappa_3^o
 \end{array}$$

Es ist erkennbar, dass man $2^n = 8$ zusätzliche Berechnungen mit maximalen und minimalen Grenzen durchführen muss, um alle möglichen Grenzfälle zu betrachten.

Im Gegensatz dazu führt eine Sensitivitätsanalyse mit finiten Differenzen nur auf den 3-fachen zusätzlichen Rechenaufwand (ein zusätzlicher Durchlauf der kompletten Rechnung pro Materialparameter). Daher ist Berechnung der Unsicherheiten mit Hilfe der Sensitivitätsanalyse in jedem Fall einer Abschätzung mit Grenzen überlegen.

6 Parameteridentifikation

Materialmodelle dienen zur mathematischen Beschreibung des komplexen Materialverhaltens unterschiedlichster Materialien. Zu jedem Zeitpunkt bleibt es nur ein Modell, was keinesfalls für sich in Anspruch nimmt, die Realität exakt und für alle Belastungsprozesse wiederzugeben. In den zugrunde liegenden Materialgleichungen sind freie Parameter enthalten, die wie bisher als Materialparameter bezeichnet werden. Diese sind grundsätzlich unbekannt und müssen so gewählt werden, dass das Materialmodell die Realität möglichst genau widerspiegelt. Aufgabe der Parameteridentifikation ist es, diese Materialparameter mit Hilfe von Optimierungsverfahren an experimentelle Daten anzupassen.

Konstitutive Modelle beschreiben einen direkten Zusammenhang aus Ursache und Wirkung von Materialeigenschaften (den Materialparametern) und der zugehörigen Materialantwort. Im Falle der Materialparameteridentifikation ist man allerdings am umgekehrten Prozess interessiert. Man möchte von der gemessenen Materialantwort (der Wirkung) auf die Ursache davon schließen. Diese Vorgehensweise wird als inverses Problem bezeichnet, siehe z.B. (Mahnken, 1998, 2000), (Tarantola, 2005). Zielsetzung ist es aus der bekannten Materialantwort die unbekannten Materialparameter zu bestimmen. Daher sind experimentelle Daten unerlässlich. In der Materialtheorie wird dieses Verfahren seit mehreren Jahrzehnten erfolgreich angewendet (Kreißig et al., 1996; Mahnken und Kuhl, 1999), z.B. in der Elasto-Plastizität (Mahnken und Stein, 1997; Kreißig et al., 2001) oder der Viskoplastizität (Mahnken und Stein, 1996b). Im Rahmen von Modellen der finiten Elastizität findet dieses Vorgehen u.a in (Scheday, 2003) Anwendung. Weiterhin finden auch neuronale Netze Anwendung im Bereich der Identifikation von Materialparametern konstitutiver Modelle (Cybenko, 1996), dies wird beispielsweise in (Huber und Tsakmakis, 2001) für viskoplastische Modelle diskutiert.

Eine Behandlung entsprechend einer stochastischen Vorgehensweise wird u.a. in (Rosić et al., 2013) und in Anwendung auf Elasto-Plastizität in (Rosić und Matthies, 2013) gezeigt.

6.1 Optimierung

Ziel der Materialparameteridentifikation ist es, die Materialparameter in der Art und Weise anzupassen, so dass die Abweichung des Materialmodells zu den experimentell vorhandenen Vergleichsdaten möglichst klein wird. Dabei werden die Materialparameter in einen Parametervektor κ zusammengefasst dargestellt. Die Anpassung eines ma-

thematischen Modells an Messdaten ist ein bekanntes Problem aus dem Themengebiet der nichtlinearen Optimierungsverfahren. Es handelt sich um sogenannte Least-Squares-Verfahren. Das grundlegende mathematische Problem wird im Allgemeinen derart formuliert, dass eine gegebene Funktion $f(\boldsymbol{\kappa})$ minimiert werden soll. Dabei können die Materialparameter $\boldsymbol{\kappa}$ weiteren Nebenbedingungen unterliegen.

Es handelt sich bei nichtlinearen¹ Optimierungsverfahren grundsätzlich um iterative Verfahren, die ausgehend von einem Startvektor $\boldsymbol{\kappa}_0$ sich dem Lösungsvektor $\boldsymbol{\kappa}^*$ iterativ nähern.

Die experimentellen Daten stellen meist eine punktweise definierte Funktion dar, welche aus $n_{\boldsymbol{\kappa}}$ Punkten besteht. Die Anzahl der im jeweiligen konstitutiven Modell vorhandenen Parameter $\boldsymbol{\kappa}$ wird mit $n_{\boldsymbol{\kappa}}$ bezeichnet ($\boldsymbol{\kappa} \in \mathbb{R}^{n_{\boldsymbol{\kappa}}}$).

Das Minimierungsproblem mit Nebenbedingungen

$$\min_{\boldsymbol{\kappa} \in \mathbb{R}^{n_{\boldsymbol{\kappa}}}} f(\boldsymbol{\kappa}) \quad \text{mit} \quad \begin{aligned} c_i(\boldsymbol{\kappa}) &= 0, \\ c_i(\boldsymbol{\kappa}) &\geq 0 \end{aligned} \quad (6.1)$$

kann mit verschiedenen Vorgehensweisen gelöst werden. Gleichheitsnebenbedingungen $c_i(\boldsymbol{\kappa})$ können von vornherein in dem betreffenden Materialmodell implementiert werden (Rieger, 2005). Häufig ist es ausgehend von physikalischen Überlegungen sinnvoll, die Parameter in Form von oberen $\mathbf{a} \in \mathbb{R}^{n_{\boldsymbol{\kappa}}}$ und unteren $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^{n_{\boldsymbol{\kappa}}}$ Grenzen zu beschränken. D.h. die Ungleichheitsnebenbedingungen reduzieren sich auf

$$a_i \leq \kappa_i \leq b_i \quad \forall i = 1, \dots, n_{\boldsymbol{\kappa}}. \quad (6.2)$$

Das Problem (6.1) ist dann gelöst, wenn ein Punkt $\boldsymbol{\kappa}^*$ gefunden wurde, bei dem die Funktion $f(\boldsymbol{\kappa})$ ein Minimum erreicht. Dies ist genau dann der Fall, wenn die Abweichung der Modellvorhersage zu den experimentell ermittelten Daten minimal wird. Als notwendige Bedingung dafür muss gelten

$$\nabla f(\boldsymbol{\kappa}) \Big|_{\boldsymbol{\kappa}=\boldsymbol{\kappa}^*} = \text{grad } f(\boldsymbol{\kappa}) \Big|_{\boldsymbol{\kappa}=\boldsymbol{\kappa}^*} = 0. \quad (6.3)$$

Bedingung (6.3) erlaubt nur eine Aussage über das Extremum der Funktion $f(\boldsymbol{\kappa})$. Hinreichend für ein Maximum ist das Kriterium:

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{\kappa}) \Big|_{\boldsymbol{\kappa}=\boldsymbol{\kappa}^*} \text{ ist positiv semidefinit} \quad (6.4)$$

Der Nabla-Operator ist dabei definiert durch,

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial \kappa_i} \mathbf{e}_i \quad (6.5)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial \kappa_i \partial \kappa_j} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^T \quad (6.6)$$

¹Lineare Optimierungsverfahren sind in dieser Arbeit nicht von Interesse und werden daher nicht tiefer untersucht.

Sind die Bedingungen (6.3) and (6.4) erfüllt und gilt

$$f(\kappa^*) \leq f(\kappa) \quad (6.7)$$

für alle κ , dann handelt es sich beim Punkt κ^* um ein globales Minimum. Ein lokales Minimum liegt vor, wenn die Bedingung (6.7) nur in einer begrenzten Umgebung von κ^* gilt. Die verschiedenen Arten von Minima sind in Abbildung 6.1 dargestellt. Es exis-

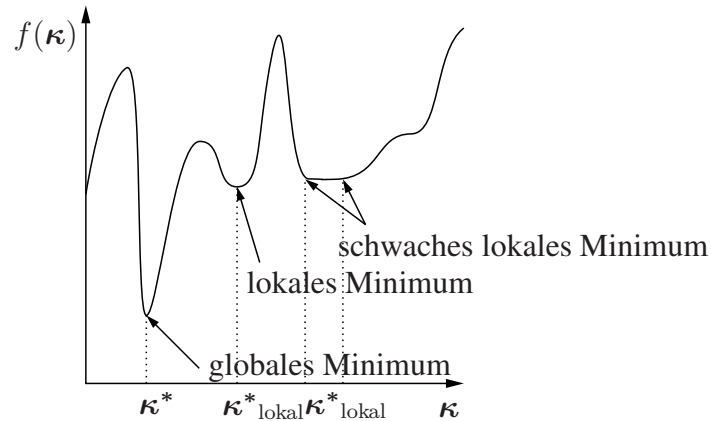


Abbildung 6.1: Arten von Minima

tieren viele verschiedene Verfahren und Herangehensweisen für solche Minimierungsprobleme. Die grobe Funktionsweise sowie die Vor- und Nachteile sollen im Folgenden kurz angesprochen werden.

6.1.1 Optimierungsverfahren

Grundsätzlich handelt es sich bei der Optimierung um das Problem der Lösung eines überbestimmten Gleichungssystems. Im Zuge der Materialparameteridentifikation besitzt man n_κ unbekannte Materialparameter κ_i , $i = 1, \dots, n_\kappa$, und m Gleichungen, welche letztendlich die Messdaten darstellen. Im Allgemeinen (aber nicht notwendigerweise) gilt

$$m \geq n_\kappa \quad \text{mit} \quad m, n_\kappa \in \mathbb{N}^+. \quad (6.8)$$

Aufgrund der Überbestimmtheit existieren mehrere Lösungen, von denen die optimale Lösung nicht ohne Weiteres ersichtlich ist. In der Tat stellt es eine Herausforderung dar, wirklich das globale Minimum zu ermitteln, da viele Optimierungsverfahren (insbesondere gradientenbasierte Verfahren) oft nur zum Auffinden lokaler Minima geeignet sind oder eine theoretisch mögliche Erkennung des globalen Minimums zu ineffizient ist, siehe (Gill et al., 1981).

deterministische Verfahren	stochastische Verfahren
Gauss-Newton	Evolutionalgorithmen
Levenberg-Marquardt	Monte Carlo Algorithmen
Simplex	Genetische Algorithmen
BFGS	Neuronale Netze

Tabelle 6.1: Einteilung von Optimierungsverfahren

Optimierungsalgorithmen sind aufgrund der Unbestimmtheit des zugrundeliegenden Problems keine Fire & Forget - Algorithmen, die nach dem Start auf eine Lösung hinarbeiten und diese nach einer bestimmten Zeit erreichen. Im allgemeinen Fall ist es nicht möglich, nur anhand der gefundenen Lösung eine Aussage darüber zu treffen, ob es sich bei dieser Lösung um ein globales oder nur ein lokales Minimum handelt. Je nach den verwendeten Toleranzen und Abbruchkriterien kann zwar die Sicherheit gesteigert werden, eine solche gefunden zu haben, allerdings steigt mit genauerer Lösung auch die Rechenzeit, da hinter jedem Funktionsaufruf (d.h. dem Berechnen der Funktion $f(\kappa)$) eines Optimierungsalgorithmus teilweise sehr komplexe Programme stehen. Zielsetzung der Parameteridentifikation ist es daher, ein für den Nutzer akzeptables Minimum zu finden, mit dem das gewählte Modell die Realität in der Weise widerspiegelt, dass es dem Problem der Anwendung gerecht wird. Aus diesem Grund werden in der Materialparameteridentifikation hauptsächlich gradientenbasierte Optimierungsalgorithmen angewendet, welche nicht zum Auffinden globaler Minima geeignet sind.

Als Fazit kann man sagen: Es existiert derzeit kein Patentrezept für die Anwendung von Optimierungsalgorithmen. Die gesamte Vorgehensweise basiert daher stark auf Erfahrungswerten sowie grundlegendem Verständnis für Numerik. Auch die Entscheidung des Nutzers, wann ein akzeptables Minimum gefunden wurde, ist schwierig und aufgrund stark variierender Problemstellungen ist es wenig sinnvoll, allgemeingültige Aussagen über die genaue Vorgehensweise zu treffen. Wann eine gefundene Lösung akzeptabel ist, muss der Nutzer stets selbst festlegen und verantworten.

Man unterteilt die Optimierungsverfahren grob in zwei Gruppen, deterministische und stochastische Verfahren. Weiterhin ist eine Unterscheidung in gradientenbasierte und gradientenfreie Verfahren sinnvoll, ausführlich ist dies in (Gill et al., 1981) und (Nocedal und Wright, 1999) ausgeführt, siehe Tabelle 6.1.

Deterministische Verfahren liefern bei gleichen Eingabedaten stets dieselbe Lösung während stochastische Verfahren mit einer zufallsbasierten Vorgehensweise arbeiten, die auch bei feststehenden Eingabedaten verschiedene Lösungen finden können.

Ein Unterproblem der allgemeinen Optimierung ist die Methode der kleinsten Quadrate bzw. die sogenannten Least-Squares Verfahren. Da dieser Ansatz für die Parameteridentifikation besonders wichtig ist, wird darauf in Abschnitt 6.2 gesondert eingegangen.

6.1.2 Allgemeine Strategien zur Vorgehensweise

Im Folgenden wird kurz die grundlegende Idee zweier essentieller Strategien wiedergegeben, die in der mathematischen Optimierung Verwendung finden. Alle Optimierungsstrategien sind iterative Methoden, welche ausgehend von einem mehr oder weniger fundiert festgelegten Startwert (*initial guess*, κ_0) durch Anwendung verschiedener Strategien aufeinanderfolgende Iterationen k vollziehen bis das Ziel erreicht, d.h. bestimmte Kriterien erfüllt sind. Die exakten Kriterien für das Auffinden und Berechnen des nächsten Iterationsschritts sollen in dieser Arbeit nicht bis ins Detail analysiert werden, da die Zielsetzung in der Anwendung solcher Verfahren liegt und nicht in deren Weiterentwicklung. In Abbildung 6.2 ist die grundlegende Arbeitsweise eines Optimierungsalgorithmus dargestellt.

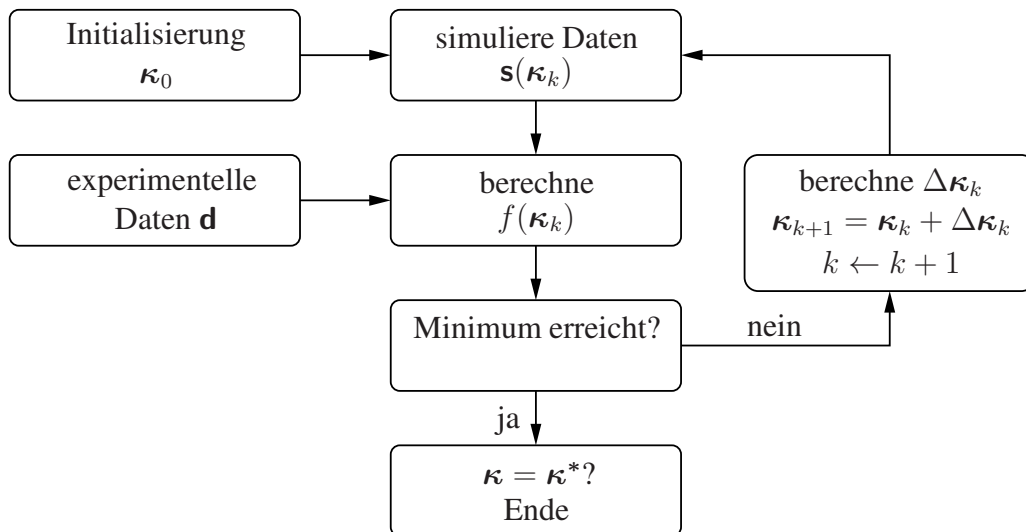


Abbildung 6.2: Ablauf einer Optimierung

Line-Search

Line-Search Algorithmen wählen nach bestimmten Kriterien eine Suchrichtung $\mathbf{p}_k \in \mathbb{R}^m$ und einen Schrittweite α für den aktuellen Wert von κ_k , so dass

$$f(\kappa_{k+1}) = f(\kappa_k + \alpha \mathbf{p}_k) < f(\kappa_k) \quad (6.9)$$

gilt. Dies geschieht durch eine begrenzte Anzahl an Testrichtungen und hängt stark vom gestellten Problem ab. Ist die zugrundeliegende Funktion $f(\kappa)$ stetig differenzierbar, so wird meist der steilste Anstieg, d.h. $\nabla f(\kappa)$ gewählt. Aber es existieren auch andere Möglichkeiten, da durchaus Probleme auftreten können, in denen die Berechnung von $\nabla f(\kappa)$ zu aufwändig oder auch gar nicht möglich ist. Die Schrittweite α kann durch

verschiedene Kriterien angepasst werden, siehe (Nocedal und Wright, 1999) und (Gill et al., 1981).

Trust-Region

Bei der Trust-Region Strategie modelliert man die Funktion $f(\boldsymbol{\kappa})$ durch eine Funktion m_k . Auch hier findet die Suche nach dem Minimum mit Hilfe einer Richtung \mathbf{p}_k statt, die in einer Umgebung die man als vertrauensvoll ansieht (die Trust-Region). Führt der Iterationsschritt nicht zur gewünschten Reduktion der Funktion $f(\boldsymbol{\kappa})$, so wird der Vertrauensbereich verkleinert und eine neue Suchrichtung berechnet. Dementsprechend verändert die Trust-Region Strategie bei jedem fehlgeschlagenen Testschritt die Suchrichtung \mathbf{p}_k , während die Line-Search Strategie die Richtung beibehält und die Schrittweite α anpasst, siehe (Nocedal und Wright, 1999), (Coleman und Li, 1996, 1994).

6.2 Least-Squares Verfahren

Die Materialparameteridentifikation wird üblicherweise als Least-Square Problem formuliert. Dieses ist eine in der Praxis wohl häufigste Methode von Optimierungsverfahren (Nocedal und Wright, 1999). Es hat aufgrund der zugrundeliegenden mathematischen Struktur des Problems bestimmte Vorteile, welche die Anwendung von gradientenbasierten Optimierungsverfahren begünstigen.

Die Abweichung des Modells von den experimentellen Daten kann mit Hilfe des Residuums $\mathbf{R}(\boldsymbol{\kappa}, t)$ ($\mathbf{R} \in \mathbb{R}^m$, $\boldsymbol{\kappa} \in \mathbb{R}^{n_\kappa}$) beschrieben werden

$$\mathbf{R}(\boldsymbol{\kappa}, t) = \mathbf{s}(\boldsymbol{\kappa}, t) - \mathbf{d}. \quad (6.10)$$

Die Simulationsdaten $\mathbf{s}(\boldsymbol{\kappa}, t) \in \mathbb{R}^m$ werden durch einen im Allgemeinen nichtlinearen Zusammenhang berechnet und sind wie die unveränderlichen experimentellen Daten $\mathbf{d} \in \mathbb{R}^m$ in einem Spaltenvektor zusammengefasst

$$\mathbf{s}^T = \{s_1, s_2, \dots, s_m\}, \quad \mathbf{d}^T = \{d_1, d_2, \dots, d_m\}. \quad (6.11)$$

Die Differenz (6.10) wird minimal, wenn auch ihre Quadratsumme minimal wird. Mit der L_2 -Norm kann man die zu minimierende Funktion $f(\boldsymbol{\kappa})$ schreiben als

$$f(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{R}(\boldsymbol{\kappa})\|_2^2 = \frac{1}{2} \mathbf{R}^T(\boldsymbol{\kappa}) \mathbf{R}(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m R_i(\boldsymbol{\kappa}) R_i(\boldsymbol{\kappa}). \quad (6.12)$$

Damit ist das Minimierungsproblem gegeben durch:

$$\min_{\boldsymbol{\kappa} \in \mathbb{R}^{n_\kappa}} f(\boldsymbol{\kappa}) = \min_{\boldsymbol{\kappa} \in \mathbb{R}^{n_\kappa}} \frac{1}{2} \|\mathbf{R}(\boldsymbol{\kappa})\|_2^2 = \min_{\boldsymbol{\kappa} \in \mathbb{R}^{n_\kappa}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^m R_i^2(\boldsymbol{\kappa}) \quad (6.13)$$

Mit der Definition des Residuums (Gleichung (6.10)) kann man den Gradienten wie folgt beschreiben (dabei wird von der Einsteinschen Summenkonvention Gebrauch gemacht²)

$$\begin{aligned} \text{grad } f(\boldsymbol{\kappa}) &= \mathbf{e}_j \frac{\partial}{\partial \kappa_j} \frac{1}{2} (R_i(\boldsymbol{\kappa}) R_i(\boldsymbol{\kappa})) = \frac{\partial R_i(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \kappa_j} R_i(\boldsymbol{\kappa}) \mathbf{e}_j = \frac{\partial R_i(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \kappa_j} R_k(\boldsymbol{\kappa}) \delta_{ki} \mathbf{e}_j \\ &= \frac{\partial R_i(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \kappa_j} R_k(\boldsymbol{\kappa}) \mathbf{e}_j (\mathbf{e}_i^\top \mathbf{e}_k) = \left(\frac{\partial R_i(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \kappa_j} \mathbf{e}_j \mathbf{e}_i^\top \right) R_k(\boldsymbol{\kappa}) \mathbf{e}_k \\ &= \frac{\partial R_i(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \kappa_j} \mathbf{e}_j \mathbf{e}_i^\top \mathbf{R}(\boldsymbol{\kappa}) = J_{ij}(\boldsymbol{\kappa}) \mathbf{e}_j \mathbf{e}_i^\top \mathbf{R}(\boldsymbol{\kappa}) = \mathbf{J}^\top(\boldsymbol{\kappa}) \mathbf{R}(\boldsymbol{\kappa}) \end{aligned} \quad (6.14)$$

Dabei ist $\mathbf{J}(\boldsymbol{\kappa})$ die Jacobi-Matrix

$$\mathbf{J}(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{\partial R_i}{\partial \kappa_j} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^\top = \frac{\partial s_i}{\partial \kappa_j} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^\top = J_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^\top, \quad (6.15)$$

welche Informationen über die Ableitung der Funktion $f(\boldsymbol{\kappa})$ nach $\boldsymbol{\kappa}$ enthält.

Der entscheidende Vorteil der Least-Square-Verfahren ergibt sich aus dem nächsten Schritt, wenn man die 2. Ableitung (6.4) berechnet. Dabei gilt Bei Anwendung des Operators ∇^2 (6.6) auf die Funktion $f(\boldsymbol{\kappa})$ (6.12) gilt:

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{\partial^2}{\partial \kappa_i \partial \kappa_j} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^\top \left(\frac{1}{2} R_k(\boldsymbol{\kappa}) R_k(\boldsymbol{\kappa}) (\mathbf{e}_k^\top \mathbf{e}_k) \right) \quad (6.16)$$

$$= \left(\frac{\partial R_k(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \kappa_i} \frac{\partial R_k(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \kappa_j} + \frac{\partial^2 R_k(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \kappa_i \partial \kappa_j} R_k(\boldsymbol{\kappa}) \right) \underbrace{(\mathbf{e}_k^\top \mathbf{e}_k) (\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^\top)}_{(\mathbf{e}_i \mathbf{e}_k^\top) (\mathbf{e}_k \mathbf{e}_j^\top)} \quad (6.17)$$

$$= J_{ki}(\boldsymbol{\kappa}) (\mathbf{e}_i \mathbf{e}_k^\top) J_{kj}(\boldsymbol{\kappa}) (\mathbf{e}_k \mathbf{e}_j^\top) + \frac{\partial^2 R_k(\boldsymbol{\kappa})}{\partial \kappa_i \partial \kappa_j} R_k(\boldsymbol{\kappa}) (\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^\top) \quad (6.18)$$

$$= \mathbf{J}^\top(\boldsymbol{\kappa}) \mathbf{J}(\boldsymbol{\kappa}) + \sum_k R_k(\boldsymbol{\kappa}) \nabla^2 R_k(\boldsymbol{\kappa}) \quad (6.19)$$

Durch eine Berechnung der ersten Ableitung (und damit der Jacobi-Matrix $\mathbf{J}(\boldsymbol{\kappa})$) erhält man aufgrund der Struktur des Least-Square Problems schon einen erheblichen rechnerischen Anteil der zweiten Ableitung. In der Nähe der Lösung und bei hinreichend kleinen Residuen $\mathbf{R}(\boldsymbol{\kappa})$ kann der weitere Anteil von $\nabla^2 f(\boldsymbol{\kappa})$ (vgl. Gleichung (6.19)) vernachlässigt werden, d.h.

$$\nabla^2 f(\boldsymbol{\kappa}) \approx \mathbf{J}^\top(\boldsymbol{\kappa}) \mathbf{J}(\boldsymbol{\kappa}). \quad (6.20)$$

²Bei Summen mit doppelt vorkommenden Indizes vereinfacht die Einsteinsche Summenkonvention die Schreibweise, wobei über alle doppelt vorkommenden Indizes automatisch summiert wird, d.h. $a_{ii} b_i = \sum_{i=1}^{n_a} a_{ii} b_i$. Die Gestalt des Summationsparameters i orientiert sich dabei stets an der Länge des zugehörigen Vektors, d.h. es wird über alle möglichen Elemente summiert. Die am häufigsten Verwendete Weise $i = 1, 2, 3$ gilt im Allgemeinen nicht.

Diese Näherung verringert die Konvergenzrate eines diese Eigenschaft ausnutzenden Algorithmus' nur geringfügig. Die Vorteile hinsichtlich des reduzierten Aufwands überwiegen aber.

Der in dieser Arbeit genutzte Algorithmus ist Bestandteil des Softwarepakets *Matlab* und werden in (Coleman und Li, 1994) näher beschrieben.

6.2.1 Lineare Least-Squares Verfahren

Ist der Zusammenhang zu den zu bestimmenden Materialparametern linear, so spricht man von einem Linear-Least-Square Problem. Dieser einfachste Fall einer Parameteranpassung kann direkt berechnet werden. Dabei wird vorausgesetzt, dass es sich um ein reguläres Problem handelt, d.h. dass das zugrundeliegende Gleichungssystem vollen Rang besitzt, d.h. wenn die Determinante der zugehörigen Jacobi-Matrix ungleich Null ist.

Die Linearität bezieht sich lediglich auf die Abhängigkeit bezüglich κ , d.h.

$$\mathbf{s}(\kappa) = \mathbf{J}\kappa, \quad \mathbf{J} \in \mathbb{R}^{m \times n_\kappa}, \kappa \in \mathbb{R}^{n_\kappa}. \quad (6.21)$$

Dabei ist \mathbf{J} die Jacobi-Matrix, d.h.

$$\mathbf{s}(\kappa, t) = \mathbf{J}(\kappa, t)\kappa. \quad (6.22)$$

Das Minimum des Problems an der Stelle κ^* erfüllt die Bedingung (6.3). Daraus folgt mit (6.14) die Gleichung

$$\mathbf{0} = \mathbf{J}^T(\mathbf{J}\kappa - \mathbf{s}) \rightarrow \mathbf{J}^T\mathbf{J}\kappa^* = \mathbf{J}^T\mathbf{s}, \quad (6.23)$$

welche mit verschiedenen Algorithmen numerisch gelöst werden kann. Eine nähere Beschreibung der zugrundeliegenden Verfahren findet sich in Gill et al. (1981) und (Nocedal und Wright, 1999).

6.2.2 Nichtlineare Least-Square Verfahren

Mehrdimensionales Newton Verfahren

Die auch Methode des steilsten Anstiegs genannte Newton-Methode wird im n_κ -dimensionalen Fall mit

$$\nabla^2 f(\kappa_k) \mathbf{p} = -\nabla f(\kappa_k) \quad (6.24)$$

formuliert. Durch die Lösung dieses Gleichungssystems wird die Suchrichtung des jeweiligen Iterationsschritts berechnet, mit der die nächste Stufe dieses Verfahrens nach

$$\kappa_{k+1} = \kappa_k + \mathbf{p} \quad (6.25)$$

berechnet wird.

Gauss-Newton Verfahren

Eines der einfachsten Verfahren zur Bestimmung eines Minimums der n_{κ} -dimensionalen Funktion $f(\kappa)$ ist die Gauss-Newton Methode. Die Ausnutzung der Least-Square Struktur erlaubt anstelle des LöSENS der Gleichung (6.24) des Newton-Verfahrens die Berechnung der Gleichung

$$\mathbf{J}_k^T \mathbf{J}_k \mathbf{p}_k^{\text{GN}} = -\mathbf{J}_k^T \mathbf{R}. \quad (6.26)$$

Die Näherungsgleichung (6.20) gilt häufig, wenn sich die Funktion $f(\kappa)$ in der Nähe der Lösung befindet und begründet den Nachteil des Gauss-Newton Verfahrens. Ist der Startvektor ungünstig gewählt, wird der Algorithmus' schnell instabil. Dafür wird in der Nähe der Lösung eine nahezu quadratische Konvergenz erreicht.

Levenberg-Marquardt Verfahren

Das Levenberg-Marquardt Verfahren als Trust-Region Anwendung des Gauss-Newton Verfahrens wurde von Levenberg (1944) und Marquardt (1963) entwickelt und zählt zu den bekanntesten der gradientenbasierten Optimierungsalgorithmen. Es nutzt die Möglichkeit, die Approximation der Hesse-Matrix (Gleichung (6.20)) auszunutzen und eine Implementierung als Trust-Region Verfahren vorzunehmen. Hierbei ist dann anstelle von Gleichung (6.26) die Gleichung

$$(\mathbf{J}_k^T \mathbf{J}_k + \lambda \mathbf{1}) \mathbf{p}_k^{\text{LM}} = -\mathbf{J}_k^T \mathbf{R} \quad (6.27)$$

auszuwerten.

6.2.3 Probleme bei der Anwendung - Konditionierung

Oftmals zeigen Least-Square Algorithmen ein instabiles Verhalten. Bei Least-Square Problemen handelt es sich in den meisten Fällen um sogenannte schlecht gestellte bzw. schlecht konditionierte Probleme. Das Auftreten von Instabilitäten kann über die Konditionszahl von $\mathbf{J}^T \mathbf{J}$ vorhergesagt werden. Diese ist definiert als

$$k = \frac{\lambda_{\min}}{\lambda_{\max}} \geq 1. \quad (6.28)$$

Dabei sind λ_i die Eigenwerte von $\mathbf{J}^T \mathbf{J}$ und

$$\lambda_{\min} = \min \lambda_i \quad \text{bzw.} \quad \lambda_{\max} = \max \lambda_i. \quad (6.29)$$

Die Konditionszahl k gibt an, wie anfällig die Funktion für kleine Störungen in ihren Argumenten ist. Je größer die Konditionszahl k ist, desto schlechter ist das mathematische Problem konditioniert und desto stärker verändern kleine Störungen in den Eingabedaten das Ergebnis.

Die Ursachen für Instabilitäten sind vielfältig und können durch Abhängigkeiten der Parameter untereinander bedingt sein. Sehr große Residuen verringern ebenso die Stabilität von bestimmten Algorithmen.

Qualität der Problemstellung

Bei der Auseinandersetzung mit Optimierungsalgorithmen stößt man schnell auf die Formulierung über gut oder schlecht gestellte Problemstellungen.

Ein mathematisches Problem ist gut gestellt, wenn gilt:

1. Das Problem hat eine Lösung
2. Die Lösung des Problems ist eindeutig
3. Die Lösung hängt stetig von den Eingangsgrößen ab.

Probleme, die nicht gut gestellt sind, sind in der Regel schlecht gestellt. Bei den meisten in der Anwendung auftretenden Least-Square Problemen trifft Aussage 1 zwar zu, aber Aussage 2 ist in den allermeisten Fällen der Parameteridentifikation verletzt. Weiterhin ist in manchen Materialmodellen eine nicht stetige Abhängigkeit der Spannungswerte von den Eingangsgrößen zu finden. Dies gilt beispielsweise für Modelle der Plastizität, die eine Formulierung über eine Fließfunktion vornehmen, siehe z.B. (Bier und Hartmann, 2006), (Hartmann et al., 1997).

6.2.4 Qualität der Optimierung

Im Sinne von Gleichung (6.1) lässt sich für die durchzuführende Optimierung der Materialparameter κ schreiben:

$$\min_{\kappa \in \mathbb{R}^{n_\kappa}} \|\mathbf{R}(\kappa)\|_2^2 \quad \text{mit} \quad \kappa_{i,\min} \geq \kappa_i \geq \kappa_{i,\max} \quad (6.30)$$

Der in Abbildung 6.2 beschriebene Algorithmus liefert letztendlich den Parametervektor κ , für den die Residuen minimal werden. Zusätzlich erhält man aus der Berechnung die Jacobi-Matrix $\mathbf{J}(\kappa)$ und kann diese nutzen, um die Sicherheit der Parameter abzuschätzen. Dazu nutzt man die Eigenschaft, dass sich mit Hilfe der Jacobi-Matrix im optimierten Punkt die Kovarianzmatrix des Vektors κ berechnen lässt. Es gilt näherungsweise

$$\check{\mathbf{C}}_{\kappa^*} \approx s^2 \mathbf{J}^T(\kappa^*) \mathbf{J}(\kappa^*), \quad (6.31)$$

wobei die empirische Standardabweichung nach (Sachs und Hedderich, 2012) aus dem Residuumsvektor $\mathbf{R}(\kappa^*)$ gebildet wird zu

$$s^2 = \frac{\mathbf{R}^T(\kappa^*) \mathbf{R}(\kappa^*)}{n - 1}. \quad (6.32)$$

Nimmt man nun an, dass die Materialparameter normalverteilt sind, so kann man die Diagonalkomponenten von $\check{\mathbf{C}}_\kappa$ nutzen, um einen Konfidenzintervall anzugeben, vergleiche z.B. (Sachs und Hedderich, 2012), (Kreißig et al., 2001) oder (Draper und Smith, 1998)

$$\Delta \kappa_i = \sqrt{\check{\mathbf{C}}_{\kappa_{ii}}}. \quad (6.33)$$

Damit kann man die berechneten Parameter inklusive ihrer Unsicherheit abschätzen.

$$\boldsymbol{\kappa} = \boldsymbol{\kappa}^* \pm \Delta \boldsymbol{\kappa}^*. \quad (6.34)$$

Zudem lässt sich die Korrelationsmatrix $\bar{\mathbf{R}}$ aus der Kovarianzmatrix berechnen, vgl. Abschnitt 4.3.4. Für jede Komponente dieser Matrix gilt nach Gleichung (4.23)

$$\rho_{\kappa_i \kappa_j} = \frac{\check{c}_{\kappa_i \kappa_j}}{\sqrt{\check{c}_{\kappa_i \kappa_i} \check{c}_{\kappa_j \kappa_j}}}. \quad (6.35)$$

Damit besitzt man ein Maß für den Zusammenhang aller Materialparameter untereinander und kann überprüfen, ob und wie stark die Parameter eines Modells voneinander abhängen.

Die Optimierung mit Hilfe von gradientenbasierten Optimierungsalgorithmen (welche die Jacobi-Matrix \mathbf{J} verwenden) lässt so ohne wesentlichen Zusatzaufwand eine Abschätzung über die Unsicherheiten der Parameter sowie über die Abhängigkeiten der Parameter untereinander zu.

6.2.5 Determinationskoeffizient

Für eine Regression wird häufig ein einzelner Wert angegeben, der die Qualität der Optimierung beschreibt. Der Determinationskoeffizient als Maß für die Qualität der Regression ist mit Vorsicht zu genießen. Es wird empfohlen, grundsätzlich immer die grafische Darstellung des Problems zu untersuchen. Dies wird anschaulich von Anscombe (1973) dargestellt. Der Determinationskoeffizient oder R^2 -Wert liegt im Intervall $[0, 1]$. Für $R^2 = 1$ liegt ein perfekter Fit vor. Allerdings wird dieser Wert in der Praxis nicht erreicht. Dies wäre nur bei fehler- und rauschfreien Messwerten der Fall. Mit Blick auf Gleichung (6.11) gilt für den Determinationskoeffizienten

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n_{\kappa}} (d_i - s_i)^2}{\sum_{i=1}^{n_{\kappa}} (d_i - \bar{d})^2}. \quad (6.36)$$

6.3 Reduktion von Materialmodellen

Im folgenden Abschnitt soll eine Vorgehensweise basierend auf (Krämer et al., 2015) vorgestellt werden, mit der konstitutive Modelle, deren Spannungsalgorithmus in in dreidimensionaler Form vorliegt, auf eine eindimensionale Formulierung reduziert werden können ohne diese zu verändern. So ist eine Nutzung bereits bestehender Modelle möglich. Dies erfolgt unter der Ausnutzung der Gleichungsstruktur des schon in Finite-Elemente Simulationen angewendeten Mehrebenen-Newton Verfahrens (siehe Abschnitt 3.4).

In Abschnitt 7.3 wird gezeigt, dass ausgehend von einer dreidimensionalen Formulierung des Materialmodells der linearen Viskoelastizität (vgl. Gleichung (7.69) und (7.70))

eine Reduktion auf eine eindimensionale Gleichung möglich ist. Es ist erkennbar, dass diese recht aufwändig ist. Trotzdem ist diese Reduktion notwendig, um gemessene Daten an das Materialmodell anzupassen. Im klassischen Zugversuch misst man nur die eindimensionale Axialspannung $\sigma(t)$ sowie die Axialverzerrung $\varepsilon(t)$. Weiterhin wird in Hinblick auf den Vergleich von Gleichung (7.63) und Gleichung (7.105) deutlich, dass die reduzierte Lösung der dreidimensionalen Formulierung nicht komplett identisch mit der eindimensional motivierten Lösung ist, vgl. Abbildung 7.25. Man erkennt daran deutlich, dass es keine Option ist, eindimensional motivierte Gleichungen zur Identifikation von Materialparametern eines dreidimensional vorhandenen Modells zu verwenden. Es ist daher notwendig, das vollständige dreidimensionale Materialmodell für eine Parameteridentifikation heranzuziehen oder dieses auf den eindimensionalen Fall zu reduzieren. Natürlich ist es möglich im Falle einaxialer Zugversuche die gesamte Probengeometrie zu diskretisieren und über das anschließende post-processing die nötigen Daten zu erhalten. Allerdings ist diese Vorgehensweise nicht zwingend notwendig, dies wird in diesem Kapitel gezeigt werden. Neben der Möglichkeit, ein einzelnes Element für die Berechnung zu nutzen, können die folgenden Überlegungen herangezogen werden.

6.3.1 Grundlegende Gedanken

Grundsätzlich berechnen die meisten Spannungsalgorithmen in Finite-Elemente Programmen aus vorgegebenen Verzerrungen die entsprechenden Spannungen. Eine umgekehrte Formulierung, d.h. dass bei vorgegebenen Spannungen die zu erwartenden Verzerrungen berechnet werden, ist zwar grundsätzlich denkbar, allerdings nur selten zu finden.

Viele Materialmodelle liegen in der Form von DAE-Systemen vor, d.h. sie haben die Struktur

$$\mathbf{T} = \mathbf{h}(\mathbf{E}, \mathbf{q}) \quad (6.37)$$

$$\dot{\mathbf{q}}(t) = \mathbf{r}(\mathbf{E}, \dot{\mathbf{E}}, \mathbf{q}). \quad (6.38)$$

Weiterhin wird durch die Ausnutzung der Symmetrie der Tensoren \mathbf{T} und \mathbf{E} eine weitere Nutzung ermöglicht. Hierzu werden die Verzerrungen und Spannungen in Spaltenform

$$\mathbf{E}^T = \{\varepsilon_{xx} \quad \varepsilon_{yy} \quad \varepsilon_{zz} \quad \gamma_{xy} \quad \gamma_{yz} \quad \gamma_{zx}\} \quad \text{notiert,} \quad (6.39)$$

sowie

$$\mathbf{T}^T = \{\sigma_{xx} \quad \sigma_{yy} \quad \sigma_{zz} \quad \tau_{xy} \quad \tau_{yz} \quad \tau_{zx}\}. \quad (6.40)$$

6.3.2 Algebraischer Zwang

Da die genaue Struktur von Finite-Elemente-Simulationen bekannt ist, kann man diese ausnutzen, um ein dreidimensional formuliertes und implementiertes konstitutives Mo-

dell auf homogene Spannungs- bzw. Verzerrungszustände zu reduzieren und so bei bestimmten Problemstellungen eine effiziente Vorgehensweise zur Parameteridentifikation zu erhalten.

Bei der Durchführung von Experimenten des einaxialen Zuges geht man im allgemeinen von einem homogenen Spannungszustand in der Mitte einer typischen Knochenprobe aus. Dabei misst man bei vorgegebenen Verschiebungen (bzw. Verzerrungen) die Kräfte (bzw. Spannungen) in axialer Richtung. Messungen in transversaler Richtung werden nicht in jedem Fall durchgeführt, besonders die Messung von transversalen Spannungen ist häufig nicht praktikabel. Die Verzerrungen in transversaler Richtung (d.h. ε_{yy} und ε_{zz}) sind nicht bekannt, dafür kann man die Aussage treffen, dass die Spannungen in transversaler Richtung identisch null sind (d.h. $\sigma_{22} = 0$ und $\sigma_{33} = 0$). Diese bekannten Spannungen entsprechen einer natürlichen Zwangsbedingung, die hier ausgenutzt werden soll.

Dazu werden die Spannungs- und Verzerrungsvektoren (\mathbf{T} bzw. \mathbf{E}) in unbekannte und bekannte Größen zerlegt. Bekannte Größen werden mit einem Strich versehen ($\bar{\mathbf{E}}$ bzw. $\bar{\mathbf{T}}$) und unbekannte Größen mit dem Index u versehen (\mathbf{E}_u bzw. \mathbf{T}_u). Für den einaxialen Zug gilt

$$\mathbf{E}^T = \{\varepsilon_{xx} \quad \varepsilon_{yy} \quad \varepsilon_{zz} \quad 0 \quad 0 \quad 0\} \quad (6.41)$$

$$\mathbf{T}^T = \{\sigma_{xx} \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0\}. \quad (6.42)$$

Die axiale Verzerrung ε_{xx} ist ganz allgemein durch die Prozessführung vorgegeben, d.h.

$$\bar{\mathbf{E}}^T = \varepsilon_{xx}, \quad \mathbf{E}_u^T = \{\varepsilon_{yy} \quad \varepsilon_{zz} \quad \gamma_{xy} \quad \gamma_{yz} \quad \gamma_{zx}\}, \quad (6.43)$$

$$\mathbf{T}_u^T = \sigma_{xx}, \quad \bar{\mathbf{T}}^T = \{\sigma_{yy} \quad \sigma_{zz} \quad \tau_{xy} \quad \tau_{yz} \quad \tau_{zx}\} = \mathbf{0}. \quad (6.44)$$

Dabei sind die Scherkomponenten der Verzerrungen im Fall des einaxialen Zuges identisch Null ($\gamma_{xy} = \gamma_{yz} = \gamma_{zx} = 0$).

Die Einführung von Zuordnungsmatrizen

$$\mathbf{Z} = [\mathbf{Z}_1 \quad \mathbf{Z}_2] \in \mathbb{R}^6 \quad (6.45)$$

ermöglicht die Aufspaltung der gegebenen Vektoren \mathbf{E} und \mathbf{T} in bekannte und unbekannte Anteile. Die Matrix $\mathbf{Z}_1 \in \mathbb{R}^{n_1}$ dient dabei zur Filterung der n_1 bekannten Verzerrungskomponenten und die Matrix $\mathbf{Z}_2 \in \mathbb{R}^{n_2}$ zum Herausfiltern der n_2 bekannten Spannungen (bzw. der n_2 unbekannten Verzerrungen). Grundsätzlich gilt wegen der Länge von \mathbf{T} bzw. \mathbf{E} , dass $n_1 + n_2 = 6$ vorliegt. Die Gestalt der Zuordnungsmatrizen \mathbf{Z}_1 bzw. \mathbf{Z}_2 hängt dabei direkt von der Problemstellung ab. Für den einaxialen Zug in der oben

gewählten Formulierung gilt

$$\mathbf{Z}_1^T = [1 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0] \in \mathbb{R}^{6 \times 1}, \quad (6.46)$$

$$\mathbf{Z}_2^T = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{6 \times 5}. \quad (6.47)$$

6.3.3 Allgemeine Formulierung

Allgemein und unabhängig von dem konkreten Prozess gilt basierend auf der Vorstellung, dass jeweils mindestens eine der Komponenten T_i bzw. E_i ($i = 1, \dots, 6$) gegeben ist

$$\bar{\mathbf{E}} = \mathbf{Z}_1^T \mathbf{E}, \quad \mathbf{E}_u = \mathbf{Z}_2^T \mathbf{E}, \quad (6.48)$$

$$\bar{\mathbf{T}} = \mathbf{Z}_2^T \mathbf{T}, \quad \mathbf{T}_u = \mathbf{Z}_1^T \mathbf{T}. \quad (6.49)$$

Die Rücktransformation kann analog angegeben werden mit

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{Z}_1 \bar{\mathbf{E}}(t) + \mathbf{Z}_2 \mathbf{E}_u(t) = \mathbf{Z}_1 \mathbf{Z}_1^T \mathbf{E}(t) + \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}_2^T \mathbf{E}(t) \quad (6.50)$$

$$\mathbf{T}(t) = \mathbf{Z}_2 \bar{\mathbf{T}}(t) + \mathbf{Z}_1 \mathbf{T}_u(t) = \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}_2^T \mathbf{T}(t) + \mathbf{Z}_1 \mathbf{Z}_1^T \mathbf{T}(t). \quad (6.51)$$

Die Gleichungen (6.37) und (6.37) können geschrieben werden als:

$$\mathbf{g}(\mathbf{T}, \mathbf{E}, \mathbf{q}) = \mathbf{T} - \mathbf{h}(\mathbf{E}, \mathbf{q}) = \mathbf{0} \quad (6.52)$$

$$\dot{\mathbf{q}} - \mathbf{r}(\mathbf{E}, \mathbf{q}) = \mathbf{0} \quad (6.53)$$

Die bekannten Spannungs- und Verzerrungskomponenten hängen explizit von der Zeit t ab. Aus Gleichung (6.52) folgt mit der Neuinterpretation

$$\hat{\mathbf{g}}(t, \mathbf{T}_u, \mathbf{E}_u, \mathbf{q}) = \mathbf{Z}_1 \mathbf{T}_u + \mathbf{Z}_2 \bar{\mathbf{T}}(t) - \mathbf{h}(\mathbf{Z}_1 \bar{\mathbf{E}}(t) + \mathbf{Z}_2 \mathbf{E}_u(t), \mathbf{q}) = \mathbf{0} \quad (6.54)$$

$$\dot{\mathbf{q}}(t) - \mathbf{r}(\mathbf{Z}_1 \bar{\mathbf{E}}(t) + \mathbf{Z}_2 \mathbf{E}_u(t), \mathbf{q}) = \mathbf{0}. \quad (6.55)$$

Gleichung (6.54) stellt dabei einen algebraischen Zwang dar. Mit der Lösung dieses DAE-Systems erhält man die unbekannten Spannungen \mathbf{T}_u , die unbekannten Verzerrungen \mathbf{E}_u und die inneren Variablen \mathbf{q} . Zudem ist es nötig, die Anfangsbedingungen zum Zeitpunkt t_0 zu kennen, d.h. $\bar{\mathbf{T}}(t_0) = \bar{\mathbf{T}}_0$, $\bar{\mathbf{E}}(t_0) = \bar{\mathbf{E}}_0$, $\mathbf{q}(t_0) = \mathbf{q}_0$.

Dazu wird die Zeit $t_0 \leq t \leq T$ in Intervalle zerlegt, d.h. $t_n \leq t \leq t_{n+1}$ mit der Schrittweite $\Delta t_n = t_{n+1} - t_n$. Die unbekannten Spannungen $\mathbf{T}_{u,n}$ und Verzerrungen $\mathbf{E}_{u,n}$ sowie die inneren Variablen \mathbf{q}_n sind zum Zeitpunkt t_n (beginnend bei $n = 0$) bekannt und für jeden Zeitschritt werden iterativ die Größen $\mathbf{T}_{u,n+1}$, $\mathbf{E}_{u,n+1}$ und \mathbf{q}_{n+1} berechnet.

Der Differentialgleichungsanteil des DAE-Systems wird an dieser Stelle beispielhaft mit Hilfe des Backward-Euler Verfahrens integriert, um die Verständlichkeit zu erhöhen. Natürlich sind auch Verfahren höherer Ordnung nutzbar, da die Struktur des DAE-Systems unverändert ist. Nähere Informationen zur Anwendung dieser Verfahren finden sich z.B. in Brenan et al. (1996) und Hairer und Wanner (1996).

Auf lokaler Ebene des Mehrebenen-Newton-Verfahrens nimmt Gleichung (6.55) die Form

$$\mathbf{l}(t_{n+1}, \mathbf{E}_{u,n+1}, \mathbf{q}_{n+1}) = \mathbf{0} \quad (6.56)$$

an, welche zusammen mit

$$\hat{\mathbf{g}}(t_{n+1}, \mathbf{T}_{u,n+1}, \mathbf{E}_{u,n+1}, \mathbf{q}_{n+1}) = \mathbf{0} \quad (6.57)$$

das zu lösende nichtlineare Gleichungssystem bildet, d.h.

$$\hat{\mathbf{g}} = \mathbf{Z}_1 \mathbf{T}_{u,n+1} + \mathbf{Z}_2 \bar{\mathbf{T}}_{n+1} - \mathbf{h}(\mathbf{Z}_1 \bar{\mathbf{E}}_{n+1} + \mathbf{Z}_2 \mathbf{T}_{u,n+1}, \mathbf{q}_{n+1}) = \mathbf{0}, \quad (6.58)$$

$$\mathbf{l} = \mathbf{q}_{n+1} - \mathbf{q}_n - \Delta t_n \mathbf{r}(\mathbf{Z}_1 \bar{\mathbf{E}}_{n+1} + \mathbf{Z}_2 \mathbf{T}_{u,n+1}, \mathbf{q}_{n+1}) = \mathbf{0}. \quad (6.59)$$

Die Lösung dieses Systems von $6 + n_q$ Gleichungssystemen ($\{\mathbf{T}_{u,n+1}, \mathbf{E}_{u,n+1}\} \in \mathbb{R}^6$ und $\mathbf{q}_{n+1} \in \mathbb{R}_q^n$) erfolgt mit Hilfe des Mehrebenen-Newton Verfahrens, welches die Grundlage für klassische finite Elemente Simulationen ist, wie in Hartmann (2005) gezeigt.

Die schon vorhandenen Materialroutinen erwarten als Eingabeparameter die Verzerrungen \mathbf{E}_n und die inneren Variable \mathbf{q}_n sowie das Zeitinkrement Δt_n und geben die Spannungen $\mathbf{T} = \mathbf{h}(\mathbf{E}_{n+1}, \mathbf{q}_{n+1})$ und die inneren Variablen \mathbf{q}_{n+1} zum gegenwärtigen Zeitpunkt zurück. Mit Hilfe der Zerlegung der Spannungen \mathbf{T} und Verzerrungen \mathbf{E} in bekannte und unbekannte Anteile, kann man das Vorgehen des Mehrebenen-Newton Verfahrens nutzen. Dazu werden zwei Vektoren eingeführt, die lediglich eine Umsortierung darstellen. \mathbf{y}_u enthält dabei alle unbekannten Spannungen und Verzerrungen und $\bar{\mathbf{y}}$ die vorgegebenen bzw. bekannten Anteile

$$\mathbf{y}_u(t) = \mathbf{Z}_1 \mathbf{T}_u(t) + \mathbf{Z}_2 \mathbf{E}_u(t) = \mathbf{Z}_1 \mathbf{Z}_1^T \mathbf{T}(t) + \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}_2^T \mathbf{E}(t) \in \mathbb{R}^6, \quad (6.60)$$

$$\bar{\mathbf{y}}(t) = \mathbf{Z}_2 \bar{\mathbf{T}}(t) + \mathbf{Z}_1 \bar{\mathbf{E}}(t) = \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}_2^T \mathbf{T}(t) + \mathbf{Z}_1 \mathbf{Z}_1^T \mathbf{E}(t) \in \mathbb{R}^6. \quad (6.61)$$

Die inneren Variablen \mathbf{q} bleiben unbekannt und sind von der Vorgehensweise unberührt. Die Rücktransformation von Gleichung (6.60) und (6.61) hat die Form

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{Z}_1 \mathbf{Z}_1^T \bar{\mathbf{y}}(t) + \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}_2^T \mathbf{y}_u(t), \quad (6.62)$$

$$\mathbf{T}(t) = \mathbf{Z}_2 \mathbf{Z}_2^T \bar{\mathbf{y}}(t) + \mathbf{Z}_1 \mathbf{Z}_1^T \mathbf{y}_u(t). \quad (6.63)$$

Des Weiteren ergeben sich aus Gleichungen (6.50) und (6.60) die Beziehungen

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \bar{\mathbf{E}}} = \mathbf{Z}_1, \quad \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{E}_u} = \mathbf{Z}_2, \quad \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \bar{\mathbf{T}}} = \mathbf{Z}_2, \quad \frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \mathbf{T}_u} = \mathbf{Z}_1, \quad (6.64)$$

welche im späteren Verlauf erforderlich wird. Zu jedem Zeitpunkt t_{n+1} wird nun formal das Gleichungssystem

$$\mathbf{G}(\mathbf{y}_u, \mathbf{q}) = \mathbf{0} \quad (6.65)$$

$$\mathbf{L}(\mathbf{y}_u, \mathbf{q}) = \mathbf{0} \quad (6.66)$$

gelöst, welches sich durch Einsetzen von Gleichung (6.60) und (6.61) in das System (6.57)-(6.56) ergibt. Um nun die gleiche algorithmische Struktur wie in klassischen finite Elemente Simulationen zu erhalten wird das Mehrebenen-Newton-Verfahren angewendet. Für mehr Informationen dazu siehe Rabbat et al. (1979) und Hartmann (2005).

6.3.4 Anwendung des Mehrebenen-Newton Verfahrens

Die Ausnutzung des Satzes über implizite Funktionen liefert nahe der Lösung die Funktion $\hat{\mathbf{q}}(\mathbf{y}_u)$, wenn die Funktion $\mathbf{L}(\mathbf{y}_u, \mathbf{q})$ stetig differenzierbar und die Ableitung $\partial \mathbf{L} / \partial \mathbf{q}$ invertierbar ist. Es reicht die Kenntnis über die Existenz von $\hat{\mathbf{q}}(\mathbf{y}_u)$ aus. Eine explizite Berechnung ist nicht notwendig und in vielen Fällen auch nicht möglich (siehe auch Abschnitt 3.4). Es gilt

$$\mathbf{G}(\mathbf{y}_u, \hat{\mathbf{q}}(\mathbf{y}_u)) = \mathbf{0} \quad (6.67)$$

Die Anwendung des Newton-Raphson Verfahrens, bzw. eines Schrittes davon liefert

$$\left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{y}_u} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{q}} \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\mathbf{y}_u} \right] \bigg|_{\mathbf{y}_u^{(m)}, \mathbf{q}^{(m)}} \Delta \mathbf{y}_u = -\mathbf{G}(\mathbf{y}_u^{(m)}, \mathbf{q}^{(m)}) \quad (6.68)$$

Die Anteile $d\hat{\mathbf{q}}/d\mathbf{y}_u$ und $\mathbf{q}^{(m)}$ sind dabei noch unbekannt und werden mit Hilfe von Gleichung (6.66) berechenbar, wenn man davon ausgeht, dass $\mathbf{y}_u^{(m)}$ im Newton-Schritt (m) bekannt ist.

$$\mathbf{L}(\mathbf{y}_u^{(m)}, \mathbf{q}^{(m)}) = \mathbf{0} \quad \rightsquigarrow \quad \mathbf{q}^{(m)}. \quad (6.69)$$

Weiterhin ist der in der Funktionalmatrix enthaltene Term $d\hat{\mathbf{q}}/d\mathbf{y}_u$ unbekannt. Dieser kann durch die Anwendung der Kettenregel auf

$$\mathbf{L}(\mathbf{y}_u, \hat{\mathbf{q}}(\mathbf{y}_u)) = \mathbf{0}, \quad (6.70)$$

berechnet werden. Dieses Vorgehen liefert das lineare Gleichungssystem

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{y}_u} + \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{q}} \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\mathbf{y}_u} = \mathbf{0} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{q}} \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\mathbf{y}_u} = -\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{y}_u}. \quad (6.71)$$

mit mehreren rechten Seiten und damit den gesuchten Term. In Tabelle 6.2 ist das Mehrebenen-Newton Verfahren knapp zusammengefasst dargestellt. Die Matrix $\partial \mathbf{G} / \partial \mathbf{y}_u$

Tabelle 6.2: Mehrebenen Newton Verfahren zum Zeitpunkt t_{n+1}

gegeben: $\mathbf{E}_{n+1}^{(0)} = \mathbf{E}_n$, $\mathbf{Q}_{n+1}^{(0)} = \mathbf{q}_n$, Δt_n	
wiederhole	$m = 0, \dots$
<i>Lokale Ebene</i> (gegeben: $\mathbf{E}_{n+1}^{(m)}$, Argumentvektor $\mathbf{z} \equiv (\mathbf{E}_{n+1}^{(m)}, \mathbf{q}_{n+1}^{(m+1)})$) Lokaler Integrationsschritt $\mathbf{L}(\mathbf{E}_{n+1}^{(m)}, \mathbf{q}_{n+1}^{(m+1)}) = \mathbf{0} \quad \rightsquigarrow \mathbf{q}_{n+1}^{(m+1)}$ konsistente Linearisierung: $\mathbf{z} \equiv (\mathbf{E}_{n+1}^{(m)}, \mathbf{q}_{n+1}^{(m+1)})$ $\left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{q}} \right]_{\mathbf{z}} \frac{d\mathbf{q}}{d\mathbf{E}} = - \left. \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{E}} \right _{\mathbf{z}} \quad \rightsquigarrow \left. \frac{d\mathbf{q}}{d\mathbf{E}} \right _{\mathbf{z}} \quad \rightsquigarrow \left. \frac{d\mathbf{q}}{d\mathbf{y}} \right _{\mathbf{z}}$	
<i>Globale Ebene</i> Lösung des linearen Gleichungssystems $\left[\left. \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{y}_u} \right _{\mathbf{z}} + \left. \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{q}} \right _{\mathbf{z}} \left. \frac{d\mathbf{q}}{d\mathbf{y}_u} \right _{\mathbf{z}} \right] \Delta \mathbf{y}_{n+1} = -\mathbf{G}(\mathbf{z}) \quad \rightsquigarrow \Delta \mathbf{y}_{u_{n+1}}$ Update der globalen Variablen $\mathbf{y}_{u_{n+1}}^{(m+1)} \leftarrow \mathbf{y}_{u_{n+1}}^{(m)} + \Delta \mathbf{y}_{u_{n+1}} \quad \rightsquigarrow \mathbf{y}_{u_{n+1}}^{(m+1)}$	
bis	Konvergenzkriterium erfüllt

enthält die Untermatrizen

$$\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{y}} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{T}_u} & \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{E}_u} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{Z}_1 & -\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{E}} \mathbf{Z}_2 \end{bmatrix}. \quad (6.72)$$

Für die Ableitung $\partial \mathbf{G} / \partial \mathbf{q}$ gilt

$$\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{q}} = -\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{q}}. \quad (6.73)$$

Gleichung (6.69) wird schon durch den Spannungsalgorithmus gelöst. Dabei werden die inneren Variablen berechnet. Da $\mathbf{y}_u^{(m)}$ gemäß Gleichung (6.60) die unbekannten Verzerungen $\mathbf{E}_u(t)$ enthält und die Spannungen \mathbf{T} berechnet werden, kann man Gleichung (6.69) umformulieren zu

$$\mathbf{L}(\mathbf{y}_u^{(m)}, \mathbf{q}^{(m)}) = \mathbf{L}(\mathbf{E}(\mathbf{E}_u), \mathbf{q}^{(m)}) = \mathbf{0}, \quad (6.74)$$

d.h. für gegebenes $\mathbf{y}_u^{(m)}$ gilt für die Ableitung $\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{y}_u}$

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{y}_u} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{T}_u} & \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{E}_u} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{E}} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{E}_u} \end{bmatrix} \stackrel{(6.64)}{=} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \Delta t_n \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{E}_u} \mathbf{Z}_2 \end{bmatrix}. \quad (6.75)$$

Die totale Ableitung von $\hat{\mathbf{q}}(\mathbf{y}_u)$ nach \mathbf{y}_u hat die Form

$$\frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\mathbf{y}_u} = \begin{bmatrix} \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\mathbf{T}_u} & \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\mathbf{E}_u} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\mathbf{T}_u} & \frac{\partial \hat{\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{E}} \frac{d\mathbf{E}}{d\mathbf{E}_u} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\mathbf{E}} \mathbf{Z}_2 \end{bmatrix}. \quad (6.76)$$

Setzt man diese Zusammenhänge nun in Gleichung (6.71) ein, so erhält man

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{q}} \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\mathbf{y}_u} = -\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{y}_u} \rightarrow \begin{bmatrix} \frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{q}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \frac{\partial \hat{\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{E}} \mathbf{Z}_2 \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} \mathbf{0} & \frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial \mathbf{E}} \mathbf{Z}_2 \end{bmatrix}, \quad (6.77)$$

woraus wiederum

$$\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{q}} \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\mathbf{E}} = -\frac{\partial \hat{\mathbf{L}}}{\partial \mathbf{E}} \rightsquigarrow \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\mathbf{E}} \quad (6.78)$$

folgt. Dies entspricht dem linearen Gleichungssystem, welches im Zuge des Mehrebenen-Newton Verfahrens gelöst werden muss, um den Tangentenoperator zu berechnen. Da man Gleichung (6.76) direkt aus Gleichung (6.78) ableiten kann, folgt für das lineare Gleichungssystem (6.68),

$$\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{y}_u} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{q}} \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\mathbf{y}_u} = \begin{bmatrix} \mathbf{Z}_1 & -\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{E}} \mathbf{Z}_2 \end{bmatrix} - \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{q}} \begin{bmatrix} \mathbf{0} & \frac{\partial \hat{\mathbf{q}}}{\partial \mathbf{E}} \mathbf{Z}_2 \end{bmatrix} \quad (6.79)$$

$$= \begin{bmatrix} \mathbf{Z}_1 & -\left[\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{E}} + \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{q}} \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\mathbf{E}} \right] \mathbf{Z}_2 \end{bmatrix}. \quad (6.80)$$

Darin ist der Term

$$\mathbf{C} = \left[\frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{E}} + \frac{\partial \mathbf{h}}{\partial \mathbf{q}} \frac{d\hat{\mathbf{q}}}{d\mathbf{E}} \right], \quad \mathbf{C} \in \mathbb{R}^{6 \times 6} \quad (6.81)$$

der konsistente Tangentenoperator, welcher von dem Spannungsalgorithmus (6.74) bereits zusammen mit $\mathbf{q}^{(m+1)}$ bereitgestellt wird, da er ein fester Bestandteil der impliziten Berechnung von Finite-Elemente Verfahren ist.

In Modellen ohne innere Variablen reduziert sich das Mehrebenen-Newton Verfahren zum Newton-Raphson Verfahren, wo für jeden Zeitschritt das nichtlineare Gleichungssystem

$$\left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{y}} \right]^{(m)} \Delta \mathbf{y}_{n+1} = -\mathbf{G}(\mathbf{y}^{(m)}) \quad (6.82)$$

gelöst werden muss.

Mit der hier vorgestellten Methodik ist es somit möglich, schon vorhandene Spannungs-routinen zu benutzen, ohne weitere Änderungen an diesen Vornehmen zu müssen. Die Ausnutzung des Mehrebenen-Newton Verfahrens ermöglicht dabei die Anwendung von Zeitintegrationsalgorithmen höherer Ordnung. Eine abschließende Darstellung im

Zuge eines diagonal-impliziten Runge-Kutta Verfahrens ist in Tabelle 6.3 dargestellt. Ohne die zusätzlichen Stufen, d.h. bei $s = 1$ wird dieses Verfahren zum klassischen Backward-Euler Verfahren.

<i>DIRK Verfahren</i>	
gegeben: $\mathbf{z}_0 \equiv (\mathbf{y}_u(\boldsymbol{\kappa}^{(k)}, t_0), \mathbf{q}(t_0))$	Argumentvektor $\mathbf{z}_n \equiv (\mathbf{y}(\boldsymbol{\kappa}^{(k)}, t_n), \mathbf{q}(t_n))$
Schleife über alle Zeitschritte $n = 0, \dots, N$	
<i>DIRK Stufe</i>	
Schleife über alle Stufen: $i = 1, \dots, s$	
$t_{ni} = t_n + c_i \Delta t_n$	
$\mathbf{S}_{ni} = \mathbf{z}_{ni} + \Delta t_n \sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} \dot{\mathbf{Y}}_{uji}$	
<i>Mehrebenen-Newton Algorithmus</i>	
$\mathbf{E}_n^{(0)} = \mathbf{E}_n(\mathbf{y}_{un}, \bar{\mathbf{y}}_n)$	
wiederhole $m = 0, \dots$	
<i>lokale Ebene</i> (gegeben: $\mathbf{z}_{ni}^{(m)} = (\mathbf{y}_{ni}^{(m)}, \mathbf{q}_{ni}^{(m)})$) $\mathbf{y}_{uji}^{(m)}, \bar{\mathbf{y}}_{ni}^{(m)} \rightarrow \mathbf{E}_{ni}^{(m)}, \mathbf{T}_{ni}^{(m)}$ lokaler Integrationsschritt $\mathbf{L}(\mathbf{E}_{ni}^{(m)}, \mathbf{q}_{ni}^{(m)}) = \mathbf{0}$ konsistente Linearisierung: $\mathbf{z}_{ni}^{(m)} = (\mathbf{y}_{ni}^{(m)}, \mathbf{q}_{ni}^{(m+1)})$ $\left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{q}} \right]_{\mathbf{z}} \frac{d\mathbf{q}}{d\mathbf{E}} = - \left[\frac{\partial \mathbf{L}}{\partial \mathbf{E}} \right]_{\mathbf{z}} \rightsquigarrow \frac{d\mathbf{q}}{d\mathbf{E}} \Big _{\mathbf{z}} \rightsquigarrow \frac{d\mathbf{q}}{d\mathbf{y}_u} \Big _{\mathbf{z}}$ $\mathbf{E}_{ni}^{(m)}, \mathbf{T}_{ni}^{(m)} \rightarrow \mathbf{y}_{uji}^{(m)}, \bar{\mathbf{y}}_{ni}^{(m)}$	
<i>globale Ebene</i> Lösung des linearen Gleichungssystems $\left[\frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{y}_u} \Big _{\mathbf{z}} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial \mathbf{q}} \Big _{\mathbf{z}} \frac{d\mathbf{q}}{d\mathbf{y}_u} \Big _{\mathbf{z}} \right] \Delta \mathbf{y}_{uji} = -\mathbf{G}(\mathbf{z}) \rightsquigarrow \Delta \mathbf{y}_{ni}^{(m)}$ update der globalen Variablen $\mathbf{y}_{uji}^{(m+1)} \leftarrow \mathbf{y}_{uji}^{(m)} + \Delta \mathbf{y}_{uji}^{(m)} \rightsquigarrow \mathbf{y}_{un}^{(m+1)}$	
bis Konvergenzkriterium erfüllt	
$\mathbf{y}_{uji} = \mathbf{y}_{uji}^{(m)}, \mathbf{q}_{ni} = \mathbf{q}_{ni}^{(m)}$	
$\rightarrow \mathbf{y}_{uji} \rightarrow \mathbf{z}_{ni}$ speichere: $\dot{\mathbf{Y}}_{uji} = (\mathbf{Y}_{uji} - \mathbf{S}_{ni}) / (\Delta t_n a_{ii})$	
$t_{n+1} = t_n + \Delta t_n, \mathbf{z}_{n+1} = \mathbf{z}_{ns}, \mathbf{q}_{n+1} = \mathbf{q}_{ns}$	

Tabelle 6.3: Ausnutzung des MLNA eingebettet in diagonal-implizite Runge-Kutta-Verfahren

Weiterhin ermöglicht die formale Einführung der Matrizen \mathbf{Z}_1 und \mathbf{Z}_2 eine effiziente Methodik, auch andere Problemfälle zu untersuchen. So kann man das Problem des

einaxialen Zuges auch in der Art formulieren, dass man die Verzerrungen

$$\bar{\mathbf{E}} = \begin{Bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ \gamma_{xy} \\ \gamma_{yz} \\ \gamma_{zx} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \varepsilon_{xx} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} = \mathbf{Z}_1^T \mathbf{E} \quad (6.83)$$

als bekannt vorgibt und somit für die unbekannten Verzerrungen

$$\mathbf{E}_u = \begin{Bmatrix} \varepsilon_{yy} \\ \varepsilon_{zz} \end{Bmatrix} = \mathbf{Z}_2^T \mathbf{E} \quad (6.84)$$

erhält. Analog ergibt sich für die Spannungen

$$\mathbf{T}_u = \begin{Bmatrix} \sigma_{xx} \\ \tau_{xy} \\ \tau_{yz} \\ \tau_{zx} \end{Bmatrix} = \mathbf{Z}_1^T \mathbf{T} \quad \text{und} \quad \bar{\mathbf{T}} = \begin{Bmatrix} \sigma_{yy} \\ \sigma_{zz} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix} = \mathbf{Z}_2^T \mathbf{T}. \quad (6.85)$$

In diesem Fall haben die Filtermatrizen die Form:

$$\mathbf{Z}_1^T = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{6 \times 4} \quad (6.86)$$

$$\mathbf{Z}_2^T = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{6 \times 2}. \quad (6.87)$$

Die restliche Vorgehensweise bleibt davon unbeeinflusst. In analoger Weise kann man andere Problemstellungen mit Hilfe der Filtermatrizen erfassen, siehe Krämer et al. (2015).

7 Beispiele

Im folgenden Teil der Arbeit sollen die in den vorangegangenen Kapiteln vorgestellten Konzepte angewandt werden. Dabei werden nicht die in Kapitel 5 hergeleiteten Ableitungen genutzt, stattdessen wurden im Zuge der Implementierung alle Ableitungen mit Hilfe von numerischer Differentiation berechnet. In allen in diesem Kapitel gezeigten Beispielen wird eine Parameteridentifikation mit Hilfe der in der Software *MATLAB* enthaltenen Routinen durchgeführt. Insbesondere wurden die in der bereitgestellten Routine *lsqnonlin* implementierten Algorithmen genutzt. Dazu wurde ein Interface für die Nutzung der in Abschnitt 6.3 vorgestellte Vorgehensweise entwickelt, welche wiederum die in dem FE-Code *TASAFEM* implementierten Materialmodelle nutzt, um die gezeigte Reduktion durchzuführen.

In Abschnitt 7.1 sowie Abschnitt 7.2 wird ein Modell der Hyperelastizität dazu genutzt, die analytische Lösung für den einaxialen Zug herzuleiten. Der daran anschließende Prozess der Parameteridentifikation dient der Erzeugung von künstlichen "Messdaten", welche weiter analysiert werden. Dabei werden die Häufigkeitsverteilungen der Materialparameter praktisch untersucht und die Wirkung auf ein konkretes dreidimensionales Beispiel analysiert.

Anschließend wird in Abschnitt 7.3 das Materialmodell der linearen Viskoelastizität untersucht und gezeigt, wie man von der Idee der Modellierung¹ bei Anwendung auf den einaxialen Zug analytisch auf die das Problem beschreibenden Gleichungen schließen kann. Damit lassen sich die analytischen Gleichungen zur Berechnung der Unsicherheiten herleiten. Mit diesen lässt sich dann eine Unsicherheitsanalyse ähnlich wie in Abschnitt 7.2 durchführen.

Im letzten Teil wird ein Materialmodell der Viskoplastizität für kleine Deformationen untersucht. Hierbei werden die Materialparameter sowie deren Streuung mit Hilfe von realen Messdaten bestimmt und die erhaltenen Ergebnisse verwendet, um am Beispiel des Rohrs unter Innendruck die Auswirkungen dieser zu studieren.

7.1 Hyperelastizität bei Inkompressibilität

Am Beispiel der Hyperelastizität soll gezeigt werden, wie aus normalverteilten pseudo-experimentellen Daten eine Verteilung von Materialparametern resultiert. Um die nu-

¹Diese ist hinreichend bekannt, aber soll an dieser Stelle trotzdem kurz angerissen werden. Vertiefend dazu seien (Lubliner, 1985), (Hartmann, 1993), (Hartmann, 2002) oder (Haupt und Lion, 2002) empfohlen.

merisch berechneten Ergebnisse zu verifizieren, wird eine analytische Lösung benötigt. Diese wird im Folgenden für ein hyperelastisches Materialmodell hergeleitet und anschließend um die Berechnung der Unsicherheiten erweitert.

Hyperelastische konstitutive Materialmodelle werden häufig zur Beschreiben des Verhaltens von Elastomeren verwendet (z.B. (Mooney, 1940), (James et al., 1975) bzw. (Sedlan, 2000) oder (Holzapfel, 2000)). Diese weisen ein inkompressibles oder nahezu-inkompressibles Verhalten auf. Das zu untersuchende Materialmodell der Hyperelastizität basiert u.a. auf der in (Rivlin und Saunders, 1951) verfolgten Vorgehensweise, unterscheidet sich aber etwas in der Struktur der Formänderungsenergie ψ , vgl. (Hartmann und Neff, 2003). Einen Überblick über die wichtigsten Modelle ist in (Drozdov, 1996) zu finden.

Die Annahme der Inkompressibilität (d.h. $J = \det \mathbf{F} = 1$) führt auf eine Zerlegung des 2. Piola-Kirchhoff Tensors in einen durch die Inkompressibilität entstehenden Zwangsspannungsanteil $\tilde{\mathbf{N}}$ und den Anteil, welcher durch die Materialgleichungen beschrieben wird

$$\tilde{\mathbf{T}} = \tilde{\mathbf{N}} + 2\rho_R \frac{d\psi(\mathbf{C})}{d\mathbf{C}}. \quad (7.1)$$

Da $\tilde{\mathbf{N}}$ keinen Anteil an der spezifischen Spannungsleistung hat, d.h. $\tilde{\mathbf{N}} \cdot \dot{\mathbf{C}} = 0$ (vgl. (Haupt, 2002)), kann man $\tilde{\mathbf{N}}$ darstellen als

$$\tilde{\mathbf{N}} = -\tilde{p}\mathbf{C}^{-1}, \quad (7.2)$$

wobei \tilde{p} einen unbestimmten äußeren Druck darstellt, den es in Hinblick auf eine geschlossene Lösung zu bestimmen gilt. Interpretiert man die Abhängigkeit der spezifischen Formänderungsenergie $\psi(\mathbf{C})$ in Gleichung (7.1) als Abhängigkeit von den Invarianten $\mathbf{I}_C, \mathbf{II}_C, \mathbf{III}_C$ mit

$$\mathbf{I}_C = \text{Sp } \mathbf{C}, \quad \mathbf{II}_C = \frac{1}{2} ((\text{Sp } \mathbf{C})^2 - \text{Sp } \mathbf{C}^2), \quad \mathbf{III}_C = \det \mathbf{C} = 1, \quad (7.3)$$

so kann man Gleichung (7.1) schreiben als

$$\tilde{\mathbf{T}} = -\tilde{p}\mathbf{C}^{-1} + 2\rho_R \frac{d\psi(\mathbf{I}_C, \mathbf{II}_C)}{d\mathbf{C}} \quad (7.4)$$

bzw. nach Anwendung der Kettenregel als

$$\tilde{\mathbf{T}} = -\tilde{p}\mathbf{C}^{-1} + 2\rho_R \left(\frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{I}_C} \frac{d\mathbf{I}_C}{d\mathbf{C}} + \frac{\partial \psi}{\partial \mathbf{II}_C} \frac{d\mathbf{II}_C}{d\mathbf{C}} \right). \quad (7.5)$$

Als Ansatz dient der in (Hartmann und Neff, 2003) vorgestellte Ansatz

$$\psi(\mathbf{I}_C, \mathbf{II}_C) = \alpha(\mathbf{I}_C^3 - 27) + c_{10}(\mathbf{I}_C - 3) + c_{01}(\mathbf{II}_C^{3/2} - 3\sqrt{3}). \quad (7.6)$$

$$\tilde{\mathbf{T}} = -\tilde{p}\mathbf{C}^{-1} + 2\rho_R \frac{d\psi}{d\mathbf{C}} \quad (7.7)$$

Die Differentiation von Gleichung (7.6) nach \mathbf{C} liefert

$$\frac{d\psi(\mathbf{C})}{d\mathbf{C}} = \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{I}_\mathbf{C}} \frac{d\mathbf{I}_\mathbf{C}}{d\mathbf{C}} + \frac{\partial\psi}{\partial\Pi_\mathbf{C}} \frac{d\Pi_\mathbf{C}}{d\mathbf{C}}. \quad (7.8)$$

Mit den Abkürzungen

$$w_1(\mathbf{I}_\mathbf{C}, \Pi_\mathbf{C}) = \frac{\partial\psi}{\partial\mathbf{I}_\mathbf{C}} = 3\alpha\mathbf{I}_\mathbf{C}^2 + c_{10}, \quad (7.9)$$

$$w_2(\mathbf{I}_\mathbf{C}, \Pi_\mathbf{C}) = \frac{\partial\psi}{\partial\Pi_\mathbf{C}} = \frac{3}{2}c_{01}\Pi_\mathbf{C}^{1/2} \quad (7.10)$$

sowie den Ausdrücken

$$\frac{d\mathbf{I}_\mathbf{C}}{d\mathbf{C}} = \mathbf{1} \quad \text{und} \quad \frac{d\Pi_\mathbf{C}}{d\mathbf{C}} = \mathbf{I}_\mathbf{C}\mathbf{1} - \mathbf{C} \quad (7.11)$$

schreibt man Gleichung (7.8) als

$$\frac{d\psi}{d\mathbf{C}} = (w_1 + w_2\mathbf{I}_\mathbf{C})\mathbf{1} - w_2\mathbf{C}. \quad (7.12)$$

Für den zweiten Piola-Kirchhoff-Tensor erhält man somit

$$\tilde{\mathbf{T}} = -\tilde{p}\mathbf{C}^{-1} + 2\rho_R \left((w_1 + w_2\mathbf{I}_\mathbf{C})\mathbf{1} - w_2\mathbf{C} - \frac{1}{3}(w_1\mathbf{I}_\mathbf{C} + 2w_2\Pi_\mathbf{C})\mathbf{C}^{-1} \right). \quad (7.13)$$

7.1.1 Einaxialer Zug

Am Beispiel des einaxialen Zuges an einem einfachen Würfel, soll die analytische Lösung motiviert werden. Aus der Annahme der Inkompressibilität folgt:

$$\lambda_q = \lambda^{-1/2} \quad \leftarrow \quad J = \det \mathbf{F} = \lambda\lambda_q^2 = 1 \quad (7.14)$$

Damit hat der Deformationsgradient des einaxialen Zuges die Gestalt

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \lambda & 0 & 0 \\ 0 & \lambda^{-1/2} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda^{-1/2} \end{bmatrix} \vec{e}_i \otimes \vec{e}_j. \quad (7.15)$$

Weiterhin gilt für den rechten Cauchy-Green Tensor und dessen Inverse

$$\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \mathbf{F} = \begin{bmatrix} \lambda^2 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & \lambda^{-1} \end{bmatrix} \vec{e}_i \otimes \vec{e}_j, \quad \mathbf{C}^{-1} = \begin{bmatrix} \lambda^{-2} & 0 & 0 \\ 0 & \lambda & 0 \\ 0 & 0 & \lambda \end{bmatrix} \vec{e}_i \otimes \vec{e}_j. \quad (7.16)$$

Die Invarianten ergeben sich damit zu

$$\mathbf{I}_C = \lambda^2 + 2\lambda^{-1} \quad (7.17)$$

$$\mathbf{II}_C = \frac{1}{2} ((\lambda^2 + 2\lambda^{-1})^2 - \lambda^4 - 2\lambda^{-2}) = 2\lambda + \lambda^{-2} \quad (7.18)$$

und die Ableitungen von w nach den Invarianten ergeben

$$w_1 = 3\alpha \mathbf{I}_C^2 + c_{10} = 3\alpha (\lambda^2 + 2\lambda^{-1})^2 + c_{10}, \quad (7.19)$$

$$w_2 = \frac{3}{2} c_{01} \mathbf{II}_C^{1/2} = \frac{3}{2} c_{01} \sqrt{2\lambda + \lambda^{-2}}. \quad (7.20)$$

Beim einaxialen Zug gilt für die Spannungen

$$\tilde{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} \tilde{\sigma}_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \vec{e}_i \otimes \vec{e}_j, \quad (7.21)$$

d.h. es folgen zwei Gleichungen, deren Lösung nach Gleichung (7.13) den Spannungszustand direkt angibt

$$\tilde{\sigma}_{xx} = -\tilde{p}\lambda^{-2} + 2\rho_R \left(w_1 + w_2 \mathbf{I}_C - w_2 \lambda^2 - \frac{1}{3} (w_1 \mathbf{I}_C + 2w_2 \mathbf{II}_C) \lambda^{-2} \right), \quad (7.22)$$

$$0 = -\tilde{p}\lambda + 2\rho_R \left(w_1 + w_2 \mathbf{I}_{\bar{C}} - w_2 \lambda^{-1} - \frac{1}{3} (w_1 \mathbf{I}_C + 2w_2 \mathbf{II}_{\bar{C}}) \lambda \right). \quad (7.23)$$

Einsetzen aller Größen liefert

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{xx} &= -\tilde{p}\lambda^{-2} + 4\alpha\rho_R(3\lambda + \lambda^4 - 4\lambda^{-5}) + \frac{4}{3}c_{10}\rho_R(1 - \lambda^{-3}) \\ &\quad + 2c_{01}\rho_R\sqrt{2\lambda + \lambda^{-2}}(\lambda^{-1} - \lambda^{-4}) \end{aligned} \quad (7.24)$$

$$\begin{aligned} 0 &= -\tilde{p}\lambda + 2\alpha\rho_R(4\lambda^{-2} - 3\lambda^4 - \lambda^7) + \frac{2}{3}c_{10}\rho_R(1 - \lambda^3) \\ &\quad + c_{10}\rho_R\sqrt{2\lambda + \lambda^{-2}}(\lambda^{-1} - \lambda^2). \end{aligned} \quad (7.25)$$

Mit dem Umstellen von Gleichung (7.25) nach \tilde{p} und dessen Einsetzen in (7.24) folgt

$$\begin{aligned} \tilde{\sigma}_{xx} &= 6\alpha\rho_R(\lambda^4 + 3\lambda - 4\lambda^{-5}) + 2c_{10}\rho_R(1 - \lambda^{-3}) \\ &\quad + 3c_{01}\rho_R\sqrt{2\lambda + \lambda^{-2}}(\lambda^{-1} - \lambda^{-4}). \end{aligned} \quad (7.26)$$

Die Cauchy-Spannungen \mathbf{T} können mit Hilfe einer push-forward Operation berechnet werden, d.h. es gilt (für $J = 1$)

$$\mathbf{T} = \frac{1}{J} \mathbf{F} \tilde{\mathbf{T}} \mathbf{F}^T = -p\mathbf{1} + 2\rho_R (w_1 \mathbf{B} - w_2 \mathbf{B}^{-1}). \quad (7.27)$$

Für den reinen einaxialen Zug gilt und eine analoge Vorgehensweise zur Lösung ergibt sich unter Zuhilfenahme der Gleichungen (7.17)-(7.20) für die Cauchy-Spannungen in Zugrichtung

$$\begin{aligned}\sigma_{xx} = & 6\alpha\rho_R(\lambda^6 + 3\lambda^3 - 4\lambda^{-3}) + 2c_{10}\rho_R(\lambda^2 - \lambda^{-1}) \\ & + 3c_{01}\rho_R\sqrt{2\lambda + \lambda^{-2}}(\lambda - \lambda^{-2}).\end{aligned}\quad (7.28)$$

Diese Gleichung kann man nutzen, um die Ableitungen hinsichtlich der Materialparameter zu berechnen und eine Sensitivitätsanalyse durchzuführen.

7.1.2 Sensitivität

Da die Spannungen nur linear von den Materialparametern $\boldsymbol{\kappa}^T = \{\alpha, c_{10}, c_{01}\}$ abhängen, gestaltet sich die Differentiation nach den Materialparametern als denkbar einfach. So kann man sofort angeben

$$\frac{d\mathbf{T}(\boldsymbol{\kappa})}{d\boldsymbol{\kappa}} = \begin{bmatrix} 6(\lambda^6 + 3\lambda^3 - 4\lambda^{-3}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 2(\lambda^2 - \lambda^{-1}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 3\sqrt{2\lambda + \lambda^{-2}}(1 - \lambda^{-2}) & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^T. \quad (7.29)$$

Geht man davon aus, dass die Unsicherheiten $\Delta\boldsymbol{\kappa}^T = \{\Delta\alpha, \Delta c_{10}, \Delta c_{01}\}$ bekannt sind, so können diese in Form der Varianzen auch ohne Kenntnis der Diagonalelemente in der Kovarianzmatrix angeordnet werden². Mit dieser Kovarianzmatrix

$$\check{\mathbf{C}}_{\boldsymbol{\kappa}} = \begin{bmatrix} \Delta\alpha^2 & 0 & 0 \\ 0 & \Delta c_{10}^2 & 0 \\ 0 & 0 & \Delta c_{01}^2 \end{bmatrix} \quad (7.30)$$

ergibt sich nach Gleichung (5.52) für die Kovarianzmatrix der Cauchy-Spannungen

$$\check{\mathbf{C}}_{\mathbf{T}} = \left[\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \right] \check{\mathbf{C}}_{\boldsymbol{\kappa}} \left[\frac{\partial \mathbf{T}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \right]^T \quad (5.52)$$

$$\check{\mathbf{C}}_{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} \Delta\sigma_{xx}^2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (7.31)$$

²Ohne eine Berechnungsvorschrift für die einzelnen Unsicherheiten $\Delta\kappa_i$, $i = 1, \dots, 3$ sind die Diagonalelemente der zugehörigen Kovarianzmatrix im Allgemeinen unbekannt und werden daher auf den Wert Null gesetzt.

Diese Form der Kovarianzmatrix entspricht aufgrund der Struktur der zugrundeliegenden Gleichungen den Erwartungen. Da die Spannungen in Nicht-Axialrichtung beim einaxialen Zug naturgemäß immer identisch Null sind, ergeben sich die Unsicherheiten in diese Richtungen ebenfalls zu Null. Für die Unsicherheit der Spannungen in x -Richtung erhält man

$$\Delta\sigma_{xx}^2 = \left(36(\lambda^{12} + 8\lambda^9 + 24\lambda^6 + 32\lambda^3 + 16)\Delta\alpha^2 + 4\lambda^4\Delta c_{10}^2 + 9(1 + 2\lambda^3)\Delta c_{01}^2 \right) (1 - \lambda^{-3})^2 \rho_R^2 \quad (7.32)$$

als Lösung.

Es ist erkennbar, dass die Wirkungen der Materialparameter auf die Varianz der Spannung in Zugrichtung sehr unterschiedlich von λ abhängen. Konkret unterscheidet sich die Ordnung des Polynoms in λ . Die Unsicherheit des Parameters α besitzt dabei die größte Gewichtung. Mit Blick auf Gleichung (7.6) erscheint dies plausibel, immerhin geht die erste Invariante $I_{\bar{\mathbf{C}}}$ mit der dritten Potenz ein, während die Anteile von c_{10} und c_{01} eine ähnliche Gewichtung haben (c_{10} besitzt letztlich eine leicht höhere Gewichtung, allerdings ist der Unterschied zu c_{01} bei weitem nicht so groß wie beim Vergleich mit dem Parameter α).

7.2 Sensitivität der Hyperelastizität

Anhand des in Abschnitt 7.1 beschriebenen Materialmodells für die Hyperelastizität soll untersucht werden, wie sich die Unsicherheiten in Messdaten und Materialparametern auf eine Simulation auswirken. Dabei wird die Annahme der Inkompressibilität wieder fallen gelassen und die Untersuchung mit dem schwach kompressiblen Materialmodell aus (Hartmann und Neff, 2003) durchgeführt. Im Gegensatz zur Inkompressibilität ist $J \neq 1$, weshalb die Zerlegung des Deformationsgradienten in einen volumenerhaltenden $\bar{\mathbf{F}}$ und volumenverändernden Anteil $\hat{\mathbf{F}}$

$$\mathbf{F} = \hat{\mathbf{F}}\bar{\mathbf{F}}. \quad (7.33)$$

berücksichtigt werden muss. Die verwendete Klasse von Materialmodellen ist von Flory (1961) beschrieben worden. Für die beiden Anteile gilt

$$\bar{\mathbf{F}} = J^{-1/3}\mathbf{F}, \quad \det \bar{\mathbf{F}} = 1, \quad \hat{\mathbf{F}} = J^{1/3}\mathbf{1}, \quad \det \hat{\mathbf{F}} = \det \mathbf{F}. \quad (7.34)$$

Zudem werden die unimodularen Cauchy-Green Tensoren $\bar{\mathbf{C}}$ und $\bar{\mathbf{B}}$ eingeführt

$$\bar{\mathbf{C}} = \bar{\mathbf{F}}^T \bar{\mathbf{F}} = J^{-2/3}\mathbf{C}, \quad \bar{\mathbf{B}} = \bar{\mathbf{F}} \bar{\mathbf{F}}^T = J^{-2/3}\mathbf{B}. \quad (7.35)$$

Die spezifische Formänderungsenergie $\psi(I_{\bar{\mathbf{C}}}, II_{\bar{\mathbf{C}}})$ setzt sich zusammen aus einem Anteil $U(J)$, welcher nur die Volumendehnung beschreibt, und einem Anteil $w(I_{\bar{\mathbf{C}}}, II_{\bar{\mathbf{C}}})$, der

die Gestaltänderung wiedergibt

$$\psi(\mathbf{I}_{\overline{\mathbf{C}}}, \mathbf{II}_{\overline{\mathbf{C}}}) = U(J) + w(\mathbf{I}_{\overline{\mathbf{C}}}, \mathbf{II}_{\overline{\mathbf{C}}}). \quad (7.36)$$

Entsprechend Hartmann und Neff (2003) wird $U(J)$ mit Hilfe des Kompressionsmoduls wie folgt definiert

$$U(J) = \frac{K}{50}(J^5 + J^{-5} - 2). \quad (7.37)$$

Auch hier erfolgt ein Ansatz der Form (7.6). Der in diesem Fall zusätzlich auftretende Parameter K wurde auf $K = 10\,000$ MPa gesetzt, um nahezu Inkompressibilität zu gewährleisten. Bei der Hyperelastizität handelt es sich um ein Materialmodell, welches zeitunabhängig ist und weiterhin keine inneren Variablen besitzt. Damit findet bei der Berechnung auch das Mehrebenen-Newton Verfahren keine Anwendung, vielmehr können die konstitutiven Gleichungen direkt gelöst werden. In der praktischen Anwendung wird aus numerischen Gründen trotzdem eine Zeitintegration durchgeführt, da das Newton-Raphson Verfahren ansonsten nicht in jedem Fall konvergiert.

Den Beginn markiert die Erzeugung von gestreuten Ausgangsdaten. Anschließend werden diese Daten mit Hilfe der Parameteridentifikation reidentifiziert und die erhaltenen Ergebnisse danach bei der Sensitivitätsanalyse verwendet.

7.2.1 Erzeugung von gestreuten Messdaten

Dass alle Messdaten einer gewissen Streuung unterliegen, steht außer Frage. Die Ursachen für diese Streuung sind sehr komplex und sollen an dieser Stelle nicht weiter diskutiert werden. Um nun die Kontrolle über die Verteilung von Eingangsdaten zu haben, werden diese künstlich erzeugt. Es wird eine Verteilung von Pseudo-Experimenten generiert und diese dann als Ausgangspunkt für eine Materialparameteridentifikation genommen. Das Ziel dabei ist nicht, die Ausgangsparameter zu reidentifizieren, d.h. es spielt keine Rolle, ob diese genau erreicht werden. Vielmehr soll der Prozess der Identifikation mit anschließender Sensitivitätsanalyse nachgestellt werden. Dieses Vorgehen hat den Vorteil, dass man alle Eingangsparameter kontrollieren und so Schlussfolgerungen auf deren Wirkung ziehen kann.

Es wird zur Generierung der zu verwendenden Daten die Kurve einer einzelnen Simulation einer Streuung unterzogen (siehe beispielhaft Abbildung 7.1a und (7.1b)). Dabei wird zwischen der *Streuung* und dem *Rauschen* von Daten unterschieden. Die Streuung beschreibt dabei die Abweichung mehrerer Versuche voneinander, während das Rauschen die Unsicherheit während eines Versuches wiedergibt. Die Streuung wird in der Art realisiert, dass die Ausgangskurve n_s -mal kopiert und um ein ΔT_{Rxx} in der Art verschoben wird, so dass die n_s erzeugten Daten einer Normalverteilung $\mathcal{N}(0, s_{n_s}^2)$ folgen. Um sicherzustellen, dass die Messdaten bei einer Streckung $\lambda = 1$ eine Spannung $T_{Rxx} = 0$ MPa aufweisen, wird jede Kurve entsprechend Gleichung (7.38) mit einer

tanh-Funktion multipliziert, was zu dem gewünschten Verlauf führt. Die Konstante λ_0 dient dabei der Anpassung des Verlaufs und liegt in den hier beschriebenen Beispielen in der Größenordnung $\lambda_0 \approx 0,18$

$$T_{Rxx}(\lambda) = T_{Rxx}^{\text{init}}(\lambda) \tanh(\lambda_0(\lambda - 1)) \quad (7.38)$$

Anschließend wird den gestreuten Kurven noch ein individuelles normalverteiltes Rauschen mit einem Mittelwert von $\overline{T}_{Rxx}^{\text{rausch}} = 0$ MPa und einer Standardabweichung von $s_{T_{Rxx}}^{\text{rausch}} = 1 \times 10^{-4}$ MPa aufgeprägt. Am Beispiel von zwei gestreuten Kurven ist dies in Abbildung 7.1c dargestellt.³ Der generierte Satz an Daten enthält $n_s = 5000$ einzelne Kurven, da somit eine sichere statistische Aussage möglich ist. Die in diesem Beispiel verwendete Streuung beträgt $s_{T_{Rxx}} = 1,5$ MPa. Der gesamte Satz an verwendeten Daten ist in Abbildung 7.1d dargestellt.

Alternativ kann man auch die Materialparameter κ selbst einer gewissen Streuung unterziehen und damit dann die zur Reidentifikation verwendeten Kurven generieren. Diese Vorgehensweise wurde bewusst nicht gewählt, da bei dem Verwendeten Modell die Beobachtung gemacht wurde, dass die zugrundeliegende Problemstellung offensichtlich gut konditionierte Probleme liefert und eine Reidentifikation der Parameter κ nahezu ausnahmslos auf die ursprünglich zur Generierung der Kurve genutzten Materialparameter $\kappa \exp \text{init}$ führt. Die Optimierung ist sehr robust und liefert auch bei sehr abwegigen Startwerten noch Resultate, die sehr gut mit den zu identifizierenden Daten übereinstimmen. Die oben beschriebene Methode verhindert dies, da nur die Ausgangsdaten mit Hilfe von einem Satz an Materialparametern generiert wurde. Zur Überprüfung bietet es sich an, die gestreuten Daten zu untersuchen. Blickt man auf die Verteilung der Messdaten an verschiedenen Streckungen λ , so erkennt man eine bei einer konstanten Streckung λ normalverteilte Anzahl an Kurven. In Abbildung 7.2 ist ein Schnitt bei $\lambda = 3$ mit einem Fit einer Normalverteilung dargestellt. Dabei erkennt man, dass die Verteilung die endgültige Streuung von $\Delta T_{Rxx} = 1,5$ MPa erreicht. Um später noch einen Größenvergleich anstellen zu können sei an dieser Stelle angemerkt, dass die relative Unsicherheit der generierten Daten $\Delta T_{Rxx}/T_{Rxx} \approx 28\%$ beträgt.

7.2.2 Parameteridentifikation

Die zuvor generierten Daten werden zur Reidentifikation herangezogen. Als Ausgangsparameter (vgl. Abbildung 7.1a) für die Reidentifikation wurden die in (Hartmann und Neff, 2003) verwendeten Parameter

$$\begin{aligned} c_{10}^{\text{init}} &= 1,788 \times 10^{-1} \text{ MPa}, \\ c_{01}^{\text{init}} &= 1,958 \times 10^{-1} \text{ MPa}, \\ \alpha^{\text{init}} &= 3,670 \times 10^{-3} \text{ MPa} \end{aligned} \quad (7.39)$$

³Eine stochastische Methode zur Generierung von synthetischen Messdaten wird z.B. von (Nörenberg und Mahnken, 2012) in der Anwendung auf Klebstoffe demonstriert.

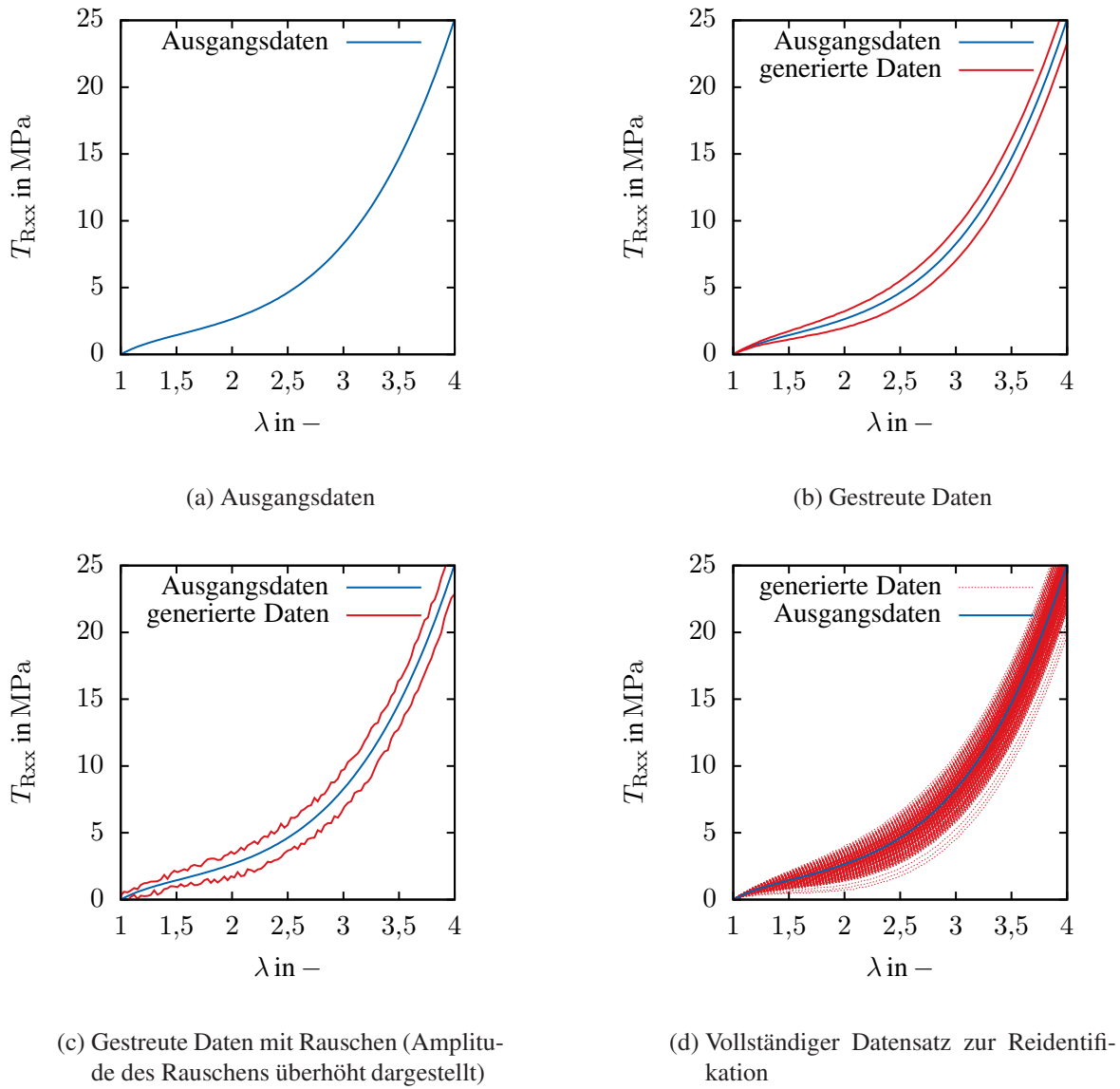


Abbildung 7.1: Prozess der Generierung von Daten

herangezogen. Die für die Optimierung notwendigen Startwerte wurden willkürlich auf

$$\begin{aligned}
 c_{10}^{(0)} &= 1,000 \times 10^{-3} \text{ MPa}, \\
 c_{01}^{(0)} &= 1,000 \times 10^{-3} \text{ MPa}, \\
 \alpha^{(0)} &= 3,000 \text{ MPa}
 \end{aligned} \tag{7.40}$$

festgelegt.

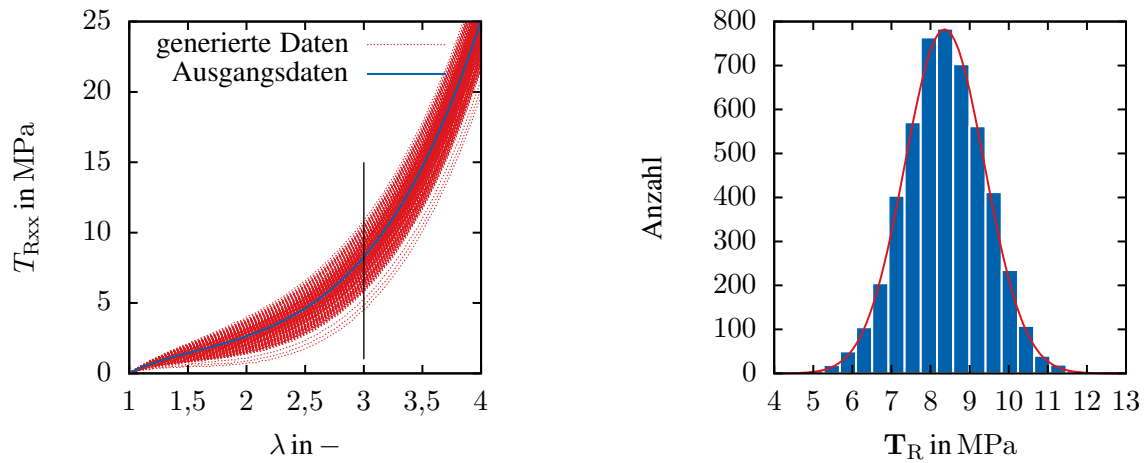


Abbildung 7.2: Überprüfung der Verteilung

Die Identifikation der Parameter kann auf zwei Weisen durchgeführt werden. Bei der Interpretation aller Daten als voneinander unabhängige Experimente, wird für jeden Datensatz eine Identifikation durchgeführt, woraus n_s Datensätze von Materialparametern κ^* resultieren. Im Gegensatz dazu kann man die Parameteridentifikation über alle Datensätze gleichzeitig laufen lassen, was durch die Annahme begründet werden kann, dass die Materialparameter alle Datensätze gleichzeitig optimal anpassen müssen. In diesem Fall erhält man nur einen Satz an Materialparametern, der im Sinne der Optimierung einen Hinweis auf die Korrelationen zwischen den Parametern gibt. Der Blick auf die Gleichung (7.6) der spezifischen Formänderungsenergie lässt eine gewisse Korrelation zwischen den Parametern c_{01} und c_{10} erwarten, da sich beide Invarianten $I_{\bar{C}}$ und $II_{\bar{C}}$ im Fall des einaxialen Zuges nahezu⁴ nur um eine Potenz von λ unterscheiden. Die zweite Invariante ist dabei um eine Größenordnung in λ kleiner als die erste Invariante. Allerdings geht diese in den zu c_{01} gehörigen Term mit einer Potenz von $3/2$ ein, während die erste Invariante bezogen auf c_{10} nur mit erster Potenz eingeht. Der Parameter α wird dabei am stärksten gewichtet, da in dem ihm zugehörigen Term die erste Invariante mit dritter Potenz eingeht. Der Parameter K wird für die Identifikation als konstant angenommen, er dient nur dazu, die für Kompressibilität formulierten konstitutiven Gleichungen dazu zu zwingen, ein nahezu inkompressibles Verhalten zu zeigen.

Einzelidentifikation

Ziel der separaten Identifikation jedes einzelnen Datensatzes ist es, eine Vielzahl von Lösungen für verschiedene Probleme zu erhalten. Dabei gilt die Einschränkung, dass die Kurven normalverteilt vorliegen. Identifiziert man jeden Datensatz einzeln, so erhält

⁴D.h. abgesehen von konstanten Faktoren.

man eine Verteilung der Materialparameter $\kappa^T = \{c_{10}, c_{01}, \alpha\}$. In Abbildung 7.3 ist erkennbar, dass die Parameter nach der Identifikation nicht mehr normal verteilt sind, sondern schwer interpretierbare Verteilungen aufweisen.

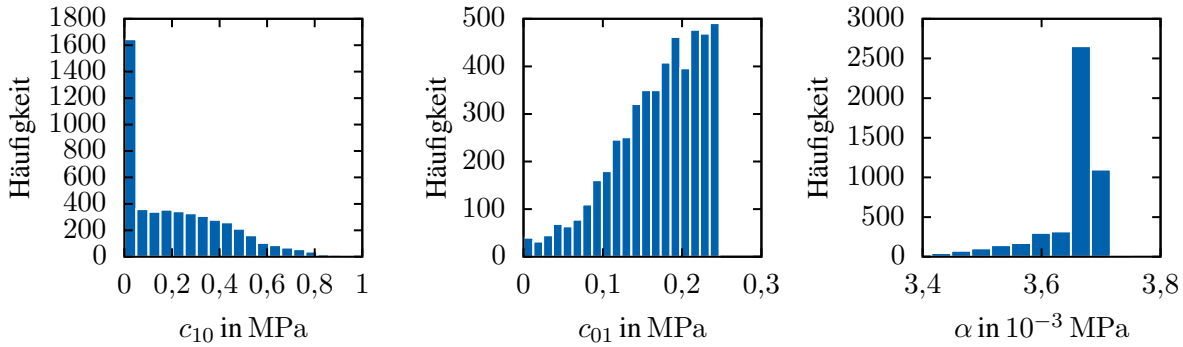


Abbildung 7.3: Häufigkeitsverteilung der identifizierten Materialparameter

Auffällig sticht hervor, dass der Parameter c_{10} häufig vom Optimierungsalgorithmus zum Wert $c_{10}^* = 0$ MPa iteriert wird, während ein anderes Verhalten beim Parameter c_{01} zu beobachten ist. Dort wirkt der Wert $c_{01}^* = 0,25$ MPa wie eine Art obere Grenze. Die untere Grenze 0 MPa ist direkter Bestandteil des Algorithmus. Es wird gefordert, dass alle Materialparameter größer oder identisch Null sein müssen. Dabei besitzen die Parameter während der Optimierung keine obere Grenze. Es lässt sich somit nicht schlussfolgern, woher genau die Grenze von 0,25 MPa des Parameters c_{01} herrührt. Der Parameter α weist in seiner Verteilung ein klares Häufigkeitsmaximum bei $\alpha = 3,67 \times 10^{-3}$ MPa auf, was dem Ausgangsparameter $\alpha^{(0)}$ entspricht.

Man erhält für jeden Datensatz Informationen über die Kovarianz und damit die Korrelation zwischen den Parametern. Diese werden nicht einzeln angegeben, sondern in Form von Häufigkeitsverteilungen dargestellt, siehe Abbildung 7.4. Offensichtlich un-

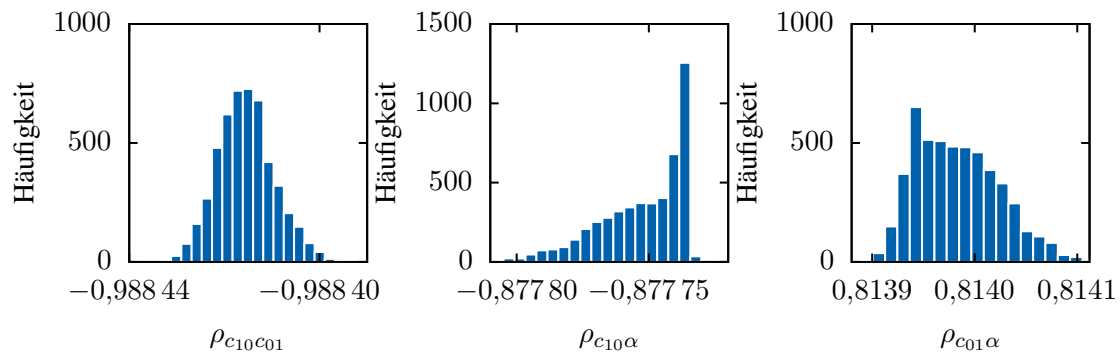


Abbildung 7.4: Häufigkeitsverteilung der Korrelationskoeffizienten

terliegen die Korrelationskoeffizienten nur einer sehr geringen Streuung. Generell erkennt man eine starke negative Korrelation zwischen den Parametern c_{10} und c_{01} von

etwa $\bar{\rho}_{c_{10}c_{01}} = -0,988$. Dies entspricht den Erwartungen, wie schon zu Beginn dieses Kapitels beschrieben. Bei den Werten $\bar{\rho}_{c_{10}c_{01}} = -0,878$ und $\bar{\rho}_{c_{10}\alpha} = 0,814$ kann man nicht von einer linearen Korrelation sprechen. Jedoch zeigt der relativ hohe Wert an, dass die Parameter nicht unabhängig voneinander das Verhalten des Materialmodells beeinflussen.

Es wird deutlich, dass die normalverteilten Ausgangsdaten nicht zu einer Normalverteilung der Materialparameter führen. Der Grund dafür liegt in der starken Korrelation der Parameter untereinander begründet. Diese rührt daher, dass das Modell der Hyperelastizität nur in axialer Richtung belastet wird. Damit beschreiben die Parameter c_{10} und c_{01} das gleiche Verhalten und man kann nicht zwischen dem Einfluss beider Parameter unterscheiden. Eine solche Unterscheidung ist im einaxialen Zug auch nicht zu erwarten. Um beide Parameter anzusprechen ist vielmehr ein biaxialer Zugversuch nötig. Die starke Korrelation zwischen beiden Parametern in diesem Fall bestätigt dies. In Abschnitt 7.2.2 wird daher die Korrelation zwischen beiden Parametern insofern unterdrückt, dass einer der Parameter für die Identifikation als konstant angenommen wird.

Gesamte Identifikation

Lässt man den Optimierungsalgorithmus alle Datensätze gleichzeitig optimieren, d.h. man nutzt nur einen sehr langen Residuumsvektor, so erhält man die in Tabelle 7.1 dargestellten Ergebnisse. Die Korrelationskoeffizienten werden dabei zu $\rho_{c_{10}c_{01}} = -0,988$,

Tabelle 7.1: Identifizierte Werte

	c_{10}/MPa	c_{01}/MPa	α/MPa
Startwert	$1,000 \times 10^{-3}$	$1,000 \times 10^{-3}$	$3,000 \times 10^0$
identifizierter Wert	$1,436 \times 10^{-1}$	$2,059 \times 10^{-1}$	$3,668 \times 10^{-3}$
Vertrauensbereich	$1,208 \times 10^{-3}$	$7,670 \times 10^{-4}$	$6,945 \times 10^{-7}$

$\rho_{c_{10}\alpha} = -0,878$ und $\rho_{c_{01}\alpha} = 0,815$ bestimmt. Diese Werte stimmen gut mit den vorher im Mittel häufigsten Werten für die Korrelationskoeffizienten der Einzelidentifikationen überein.

Identifikation mit zwei Parametern

Die vorhergehenden Beispiele haben gezeigt, dass die Parameter c_{10} und c_{01} stark korrelieren. Aus diesem Grund wird im folgenden der Parameter c_{10} bei seinem Startwert festgehalten und die Identifikation in analoger Weise erneut durchführt. Dabei ergeben sich die in Tabelle 7.2 dargestellten Ergebnisse.

Tabelle 7.2: Identifizierte Werte (ohne c_{01})

	Optimierung			
	aller Versuche		einzelner Versuche	
	c_{10}/MPa	α/MPa	\bar{c}_{10}/MPa	$\bar{\alpha}/\text{MPa}$
Startwert	$1,000 \times 10^{-3}$	$3,000 \times 10^0$	$1,000 \times 10^{-3}$	$3,000 \times 10^0$
identifizierter Wert	$4,624 \times 10^{-1}$	$3,517 \times 10^{-3}$	$4,805 \times 10^{-1}$	$3,527 \times 10^{-3}$
Vertrauensbereich	$1,934 \times 10^{-4}$	$4,250 \times 10^{-7}$	$1,519 \times 10^{-1}$	$7,416 \times 10^{-5}$

Mit einem Determinationskoeffizienten von $R = 0,9975$ wird der Korrelationskoeffizient zu $\rho_{c_{10}\alpha} = -0,8307$ bestimmt. Im Unterschied zur Identifikation aller drei

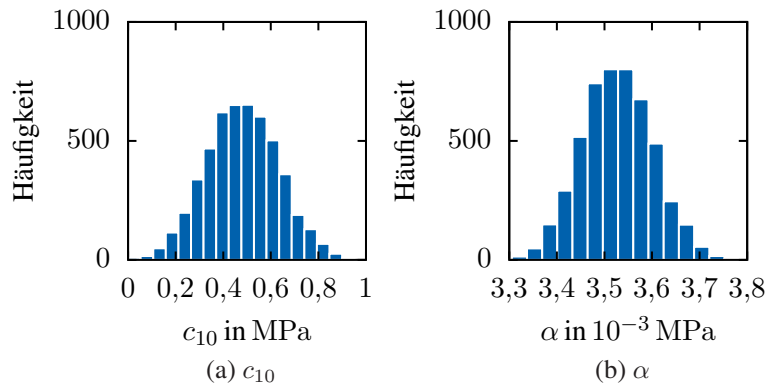


Abbildung 7.5: Häufigkeitsverteilung der identifizierten Materialparameter

Parameter ist ersichtlich, dass die identifizierten Parameter eine klare Normalverteilung aufweisen. Dies unterstützt die Erwartung, dass die Parameter c_{10} und c_{01} zusammenhängen.

Die Kovarianzmatrix für dieses Beispiel ist:

$$\check{\mathbf{C}}_{\kappa} = \begin{bmatrix} 8,2101 \times 10^{-2} & -1,4913 \times 10^{-3} \\ -1,4913 \times 10^{-3} & 3,9289 \times 10^{-5} \end{bmatrix} \text{MPa}^2. \quad (7.41)$$

Nachdem die Korrelation der Parameter c_{10} und c_{01} in sofern unterdrückt wurde, als dass nur einer der Parameter zur Optimierung herangezogen wurde, zeigen sich die erwarteten Normalverteilungen. Dies bekräftigt die weitläufige Annahme, dass unkorrelierte Materialparameter normalverteilt sind und zeigt eindrucklich, dass eine Überprüfung der Korrelation wichtiger Bestandteil einer Identifikation von Parametern ist. Eine Verletzung der Grundannahme, dass die Parameter voneinander unabhängig (d.h. unkorreliert) sind, verletzt wie zu erwarten auch die Annahme, dass die Materialparameter normalverteilt vorliegen.

Eine interessante Beobachtung ist die Tatsache, dass obwohl die Streuung der Ausgangsdaten bei $\Delta \mathbf{T}_{Rxx} / \mathbf{T}_{Rxx} \approx 28\%$ lag, die relative Unsicherheit der Parameter bei $\Delta c_{10} / c_{10} \approx 0,043\%$ und $\Delta \alpha / \alpha \approx 0,013\%$ liegt. Dies liegt an der großen Anzahl $n_s = 5000$ von verwendeten Datensätzen. Für eine kleinere Anzahl ergeben sich größere relative Fehler, wobei die Absolutwerte der Parameter nur bedingt von n_s abhängen. Die Werte der Parameter c_{10} und α schwanken ebenfalls mit der Anzahl an verwendeten Daten, konvergieren allerdings für große Werte $n_s > 1000$ gegen die in Tabelle 7.2 gezeigten Ergebnisse. In Abbildung 7.6a erkennt man diese Schwankungen der Parameter. Die relativen Fehler fallen ebenso wie die absoluten Fehler für steigendes n_s . Die doppeltlogarithmische Darstellung in Abbildung 7.6b zeigt, dass die Fehler ihren Wert in Form einer fallenden Exponentialfunktion verringern. Da im Allgemeinen für eine Identifikation nur wenige Datensätze zur Verfügung stehen, kann man davon ausgehen, dass auch die resultierenden Unsicherheiten in der praktischen Anwendung deutlich größer sind.

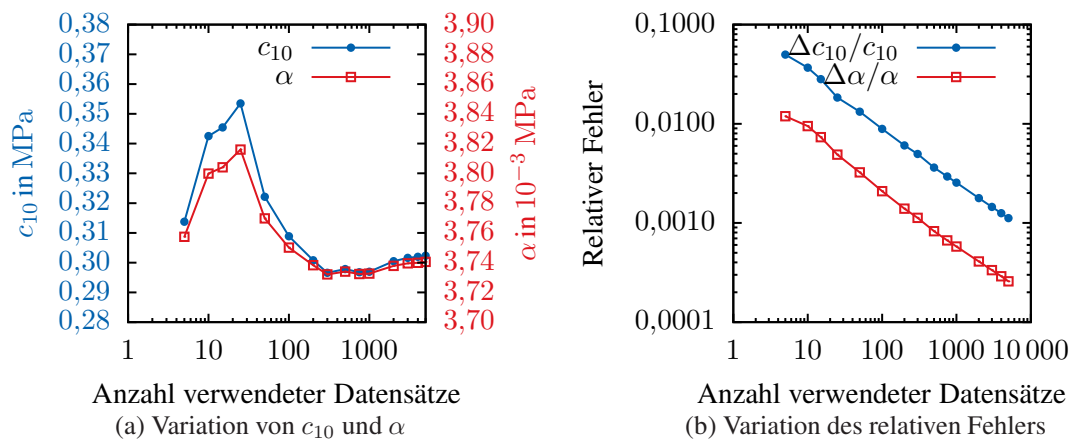


Abbildung 7.6: Abhängigkeit von der Anzahl an verwendeten Pseudo-Experimenten

7.2.3 Sensitivitätsanalyse

Anhand eines Abstandshalters aus (vgl. Abbildung 7.7) wird im Folgenden untersucht, wie sich die Kenntnis der Kovarianzmatrix auf konkrete Rechenergebnisse auswirkt.

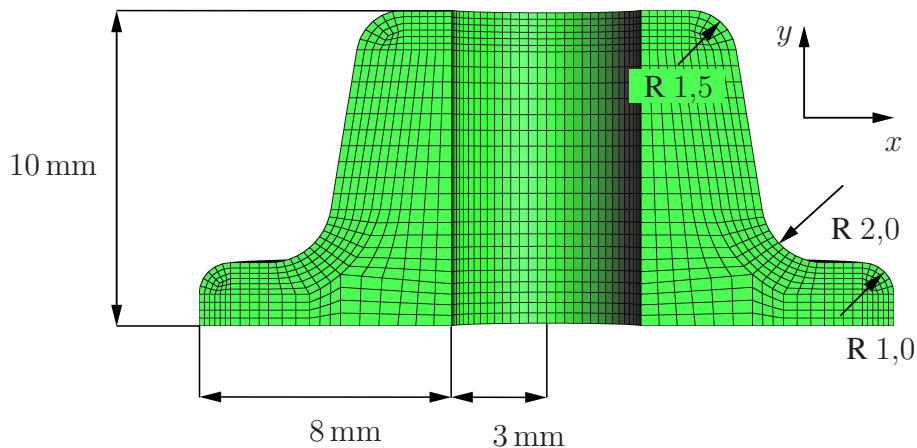


Abbildung 7.7: Abmessungen des Abstandshalters (in mm)

Dazu wird der in Abbildung 7.8 dargestellte Abstandshalter einer Belastung in der Art unterzogen, dass in einem ersten Schritt in negative y -Richtung auf ihn gedrückt wird. Nach Abschluss dieses Vorgangs wird er einer Scherung in x -Richtung unterzogen. Dabei wird die Unterseite des Abstandshalters an allen Punkten in x - und y -Richtung festgehalten. Das gesamte Modell besteht aus 13 760 quadratischen 20-knotigen $Q1P0$ -Elementen mit insgesamt 15 807 Knoten.

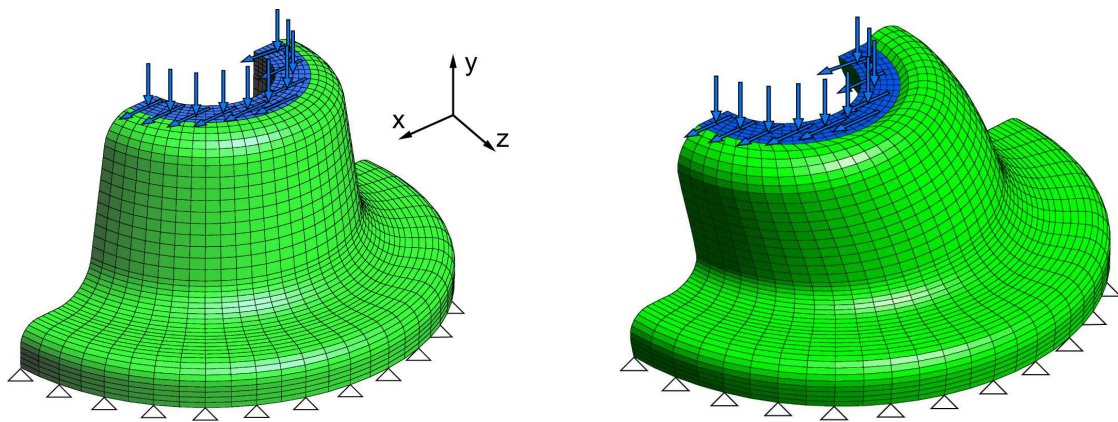


Abbildung 7.8: Belastungsprozess

Die Berechnungen werden mit dem Finite-Elemente Programm *TASAFEM* (Hartmann, 2006) durchgeführt. Dabei wird untersucht, wie sich die Kenntnis der Kovarianzmatrix auf die letztlich erhaltenen Ergebnisse auswirkt.

Gemischte Formulierung

Weil einfache Verschiebungselemente für Nahezuinkompressibilität ein zu steifes Verhalten aufweisen, werden im Falle der Hyperelastizität gemischte Elemente verwen-

det, welche auf der Dreifeld-Formulierung von Simo und Taylor (1991) bzw. Simo et al. (1985) basieren. Dabei wird die Variationsformulierung insofern modifiziert, als dass zwei zusätzliche skalare Unbekannte auftreten. Dabei handelt es sich um die Volumendehnung Θ und den Lagrange-Multiplikator λ . Mit der Anwendung der vertikalen Liniemethode führt dies ebenfalls auf ein DAE-System, welches mit den in Abschnitt 3.3 erwähnten Vorgehensweisen behandelt werden kann. Dabei werden für Θ und λ ebenfalls elementweise stetige Ansatzfunktionen genutzt und führen auf sogenannte $Q1P0$ - oder $Q2P1$ -Elemente, welche u.a. in (Wriggers, 2008) beschrieben werden. Eine detaillierte Herleitung und Betrachtung dazu findet sich auch in (Hartmann, 2003).

7.2.4 Einflussuntersuchung

Da der Fall der Identifikation der drei Parameter c_{10} , c_{01} und α die Korrelation $\rho_{c_{10}c_{01}}$ sehr stark ist, werden für die Untersuchung am konkreten Beispiel die Ergebnisse der zweiten Untersuchung (vgl. Abschnitt 7.2.2) genutzt. Der Parameter K besitzt weiterhin den festen Wert $K = 10$ GPa. Die Parameter c_{10} und α besitzen nach Abschnitt 7.2.2 die Werte

$$c_{10} = (4,6240 \pm 0,0020) \times 10^{-1} \text{ MPa} \quad (7.42)$$

$$\alpha = (3,5170 \pm 0,0004) \times 10^{-3} \text{ MPa}, \quad (7.43)$$

wobei zusätzlich noch die Nebendiagonalterme von $\check{\mathbf{C}}_{\kappa}$ bekannt sind. Die relativen Unsicherheiten betragen $\Delta c_{10}/c_{10} = 0,043\%$ sowie $\Delta \alpha/\alpha = 0,013\%$ und sind damit sehr klein.

Häufig ist man nicht in der Lage, die gesamte Kovarianzmatrix der Unsicherheiten zu berechnen. Dies resultiert z.B. daraus, dass man einzelne Parameter unabhängig voneinander identifiziert. In einem solchen Fall sortiert man die Unsicherheiten entsprechend Gleichung (5.52) in die Kovarianzmatrix ein, die Nebendiagonalelemente dieser bleiben dabei Null. Um nun zu untersuchen, inwiefern sich die Unkenntnis der Kopplungsterme auf die letztendlich erhaltenen Unsicherheiten auswirkt, werden zwei Fälle betrachtet. Unsicherheiten, die aus der vollständig besetzten Kovarianzmatrix resultieren werden mit Δ bezeichnet (z.B. Δu_y) und Unsicherheiten, welche aus einer reinen Diagonalmatrix folgen mit $\underline{\Delta}$ (z.B. $\underline{\Delta} u_y$). Für die vollbesetzte Matrix $\check{\mathbf{C}}_{\mathbf{U}}$ gilt

$$\begin{aligned} \check{\mathbf{C}}_{\mathbf{U}} &= \begin{bmatrix} (\Delta u_1)^2 & \check{c}_{u_1 u_2} & \dots & \check{c}_{u_1 u_{n_u}} \\ \check{c}_{u_2 u_1} & (\Delta u_2)^2 & \dots & \check{c}_{u_2 u_{n_u}} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \check{c}_{u_{n_u} u_1} & \check{c}_{u_{n_u} u_2} & \dots & (\Delta u_{n_u})^2 \end{bmatrix} = \left[\frac{d\mathbf{U}}{d\boldsymbol{\kappa}} \right] \check{\mathbf{C}}_{\boldsymbol{\kappa}} \left[\frac{d\mathbf{U}}{d\boldsymbol{\kappa}} \right]^T \\ &= \left[\frac{d\mathbf{U}}{d\boldsymbol{\kappa}} \right] \begin{bmatrix} (\Delta \kappa_1)^2 & \check{c}_{\kappa_1 \kappa_2} & \dots & \check{c}_{\kappa_1 \kappa_{n_{\kappa}}} \\ \check{c}_{\kappa_2 \kappa_1} & (\Delta \kappa_2)^2 & \dots & \check{c}_{\kappa_2 \kappa_{n_{\kappa}}} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \check{c}_{\kappa_{n_{\kappa}} \kappa_1} & \check{c}_{\kappa_{n_{\kappa}} \kappa_2} & \dots & (\Delta \kappa_{n_{\kappa}})^2 \end{bmatrix} \left[\frac{d\mathbf{U}}{d\boldsymbol{\kappa}} \right]^T. \end{aligned} \quad (7.44)$$

Dementsprechend wird die Berechnung bei Unkenntnis der Nebendiagonalelemente entsprechend Gleichung (7.45) durchgeführt

$$\begin{aligned}
 \check{\mathbf{C}}(\mathbf{U}) &= \begin{bmatrix} (\underline{\Delta}u_1)^2 & \check{c}_{u_1u_2} & \cdots & \check{c}_{u_1u_{n_u}} \\ \check{c}_{u_2u_1} & (\underline{\Delta}u_2)^2 & \cdots & \check{c}_{u_2u_{n_u}} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \check{c}_{u_{n_u}u_1} & \check{c}_{u_{n_u}u_2} & \cdots & (\underline{\Delta}u_{n_u})^2 \end{bmatrix} = \left[\frac{d\mathbf{U}}{d\boldsymbol{\kappa}} \right] \text{diag} \left\{ \begin{pmatrix} (\Delta\kappa_1)^2 \\ \vdots \\ (\Delta\kappa_{n_\kappa})^2 \end{pmatrix} \right\} \left[\frac{d\mathbf{U}}{d\boldsymbol{\kappa}} \right]^T \\
 &= \left[\frac{d\mathbf{U}}{d\boldsymbol{\kappa}} \right] \begin{bmatrix} (\Delta\kappa_1)^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & (\Delta\kappa_2)^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & (\Delta\kappa_{n_\kappa})^2 \end{bmatrix} \left[\frac{d\mathbf{U}}{d\boldsymbol{\kappa}} \right]^T. \quad (7.45)
 \end{aligned}$$

Es sei angemerkt, dass die Rechnung nur für die Diagonalelemente der Matrix $\check{\mathbf{C}}_{\mathbf{U}}$ bzw. $\check{\mathbf{C}}_{\boldsymbol{\tau}}$ durchgeführt wird. Theoretisch ist es denkbar, dass man die Kovarianzmatrix der Verschiebungen $\check{\mathbf{C}}_{\mathbf{U}}$ bzw. der Spannungen $\check{\mathbf{C}}_{\boldsymbol{\tau}}$ berechnen könnte. Der dafür notwendige Aufwand ist allerdings nicht gerechtfertigt, solange man keine konkreten Ziele damit verfolgt.⁵

Belastet man den Abstandshalter, wie in Abbildung 7.8 dargestellt, und betrachtet anschließend die Verschiebungen sowie Spannungen und deren Fehler, so ist erkennbar, dass sich die Unsicherheiten in den Parametern sehr unterschiedlich auswirken. Entlang der in Abbildung 7.9 dargestellten Konturen werden die Verschiebungen und Spannungen sowie deren Fehler untersucht. Entsprechend der Nummer der Kontur werden die untersuchten Größen jeweils mit dem Superskript *I* bzw. *II* versehen. Entlang der Kontur verläuft die diskrete Bogenlänge $s = 1, \dots, 49$.

⁵Bei einem System mit n_u Knoten besitzt die zu berechnende Kovarianzmatrix $\check{\mathbf{C}}_{\mathbf{U}}$ die Größe $n_u \times n_u$, was für komplexe Systeme schnell auf einen enormen Speicherbedarf führt. Berechnet man direkt nur die Diagonalelemente (unter Einbeziehung der gesamten Komponenten der Kovarianzmatrix $\check{\mathbf{C}}_{\boldsymbol{\kappa}}$) so bleibt der Speicheraufwand mit n_u zusätzlichen Werten vertretbar. Für das Matrixprodukt $\mathbf{C} = \mathbf{A}\mathbf{B}\mathbf{A}^T$ gilt $c_{ii} = \sum_{n=1}^{n_b} \sum_{j=1}^{n_b} a_{ij} a_{in} b_{jn}$, eine kurze Herleitung dazu findet sich im Anhang (Kapitel 3).

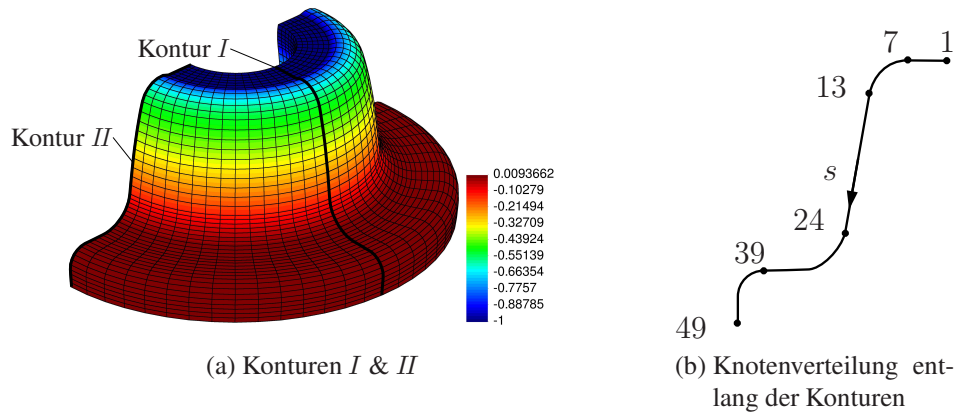


Abbildung 7.9: Knotenverschiebungen u_y in mm

1. Stufe

Im Folgenden wird die erste Stufe des Belastungsprozesses betrachtet. Dabei wird der Abstandshalter um $u_y = -1$ mm gedrückt. Das entsprechende Verhalten der Knotenverschiebungen erkennt man in Abbildung 7.9. Aufgrund der Aufbringung dieser Lasten werden die Verschiebungen und Cauchy-Spannungen in diese Richtung untersucht (u_y bzw. σ_{yy}).

Verschiebungen Die Verschiebungen in y -Richtung zeigen deutlich, dass die größten Unsicherheiten am oberen Rand auftreten. Sie sind in Abbildung 7.9 dargestellt.

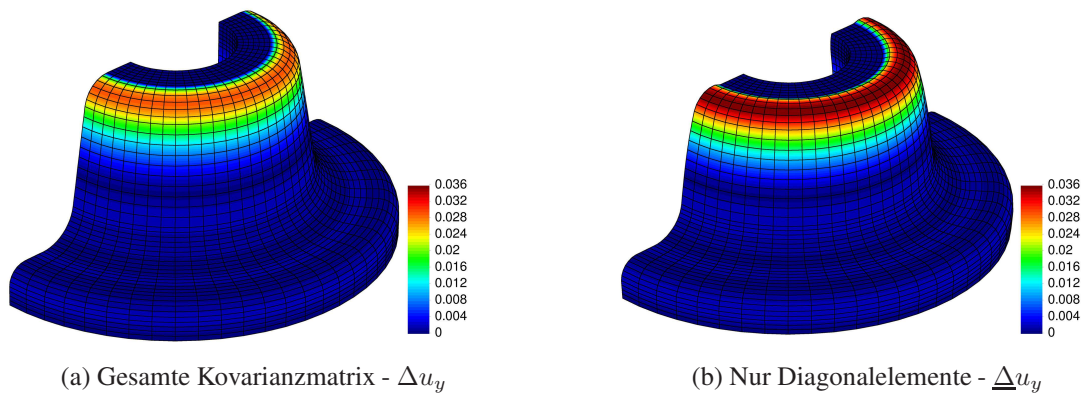


Abbildung 7.10: Unsicherheiten der Knotenverschiebungen u_y in mm

Die Unsicherheiten lassen sich vergleichen, wenn man die Verschiebungen jedes Knotens in y -Richtung entsprechend der in Abbildung 7.9 hervorgehobenen Linien und die

dazugehörigen Unsicherheiten darstellt. Es sind dabei zwei Bereiche in Form einer Kontur ausgewählt, an denen die Verschiebungen und Spannungen ausgewertet werden. Die erste Kontur (*I*) verläuft in Richtung der *z*-Achse und der zweite Teil (*II*) in Richtung der *x*-Achse.

Man erkennt die radialsymmetrische Eigenschaft des Problems während der ersten Stufe.⁶ In Abbildung 7.11 sowie Abbildung 7.12 kann man erkennen, dass die Unsicherheiten bei Unkenntnis der Nebendiagonalterme größer sind als bei der gesamten Nutzung der Kovarianzmatrix $\check{\mathbf{C}}_{\kappa}$. Dies zeigt deutlich, dass die Einbeziehung der gesamten Kovarianzmatrix nicht notwendigerweise größere Unsicherheiten liefert. Im direkten Vergleich entstehen Unterschiede von bis zu 35 %. Grundsätzlich lässt sich sagen, dass die Nutzung der Nebendiagonalelemente der Kovarianzmatrix nichts am qualitativen Verlauf der Unsicherheiten ändert. Für die Verschiebung in alle Richtungen und auch für alle Spannungen liegen die Korrelationskoeffizienten bei $\rho_{\Delta\Delta} \geq 0,96$. Der zugehörige *t*-Test mit $n_b = 49 - 7 = 42$ Werten und $n_{\kappa} = 2$ (vgl. Abschnitt 4.6.2) zeigt, dass die Korrelation mit einer Vertrauenswahrscheinlichkeit von $\alpha = 99,9\%$ statistisch signifikant ist. Um möglichst sichere Aussagen zu treffen, wird im weiteren der *t*-Test immer mit gleicher Vertrauenswahrscheinlichkeit durchgeführt und danach beurteilt, ob von einer Korrelation gesprochen werden kann.

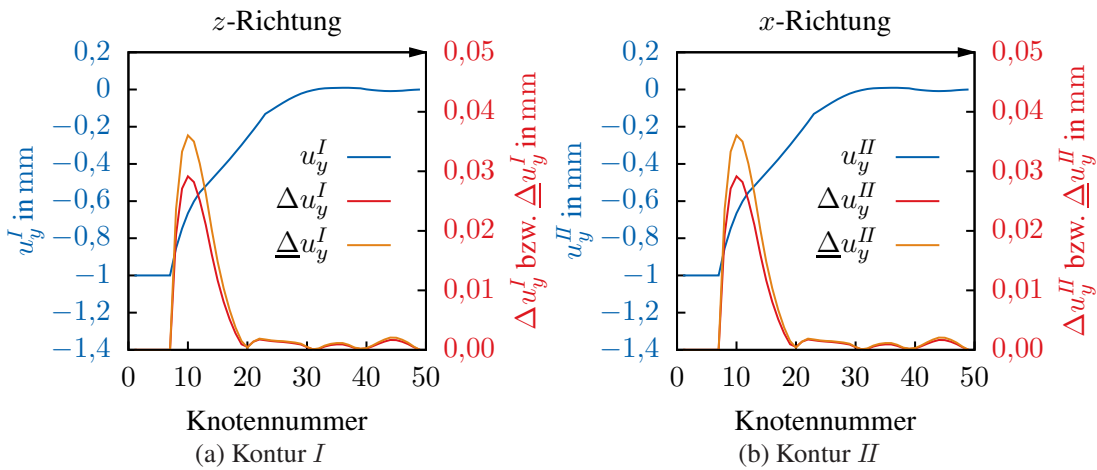


Abbildung 7.11: Knotenverschiebungen u_y von Innen nach Außen

Weiterhin wird deutlich, dass die Unsicherheiten ihr Maximum in der Nähe der Belastungen aufweisen (Knotennummer 6-15). Die Verschiebungen u_z^II der Kontur *II* und deren Unsicherheiten Δu_z^II bzw. $\underline{\Delta} u_z^II$ sind aufgrund der Symmetrierandbedingungen des Problems immer identisch Null. Berechnet man die Korrelation zwischen den Verschiebungen und ihrer Unsicherheit, so erhält man $\rho_{u_y \Delta u_y}^I = -0,742$ sowie $\rho_{u_y \Delta u_y}^II = -0,629$.

⁶Dies ist in der zweiten Stufe nicht mehr gegeben.

Ein t -Test lässt auf den Schluss zu, dass es sich dabei um eine, wenn auch schwache, Korrelation handelt⁷.

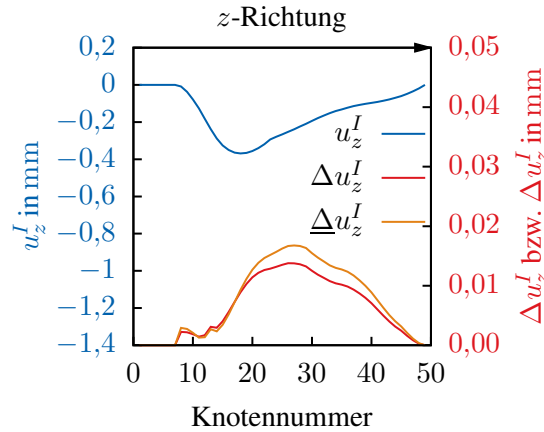


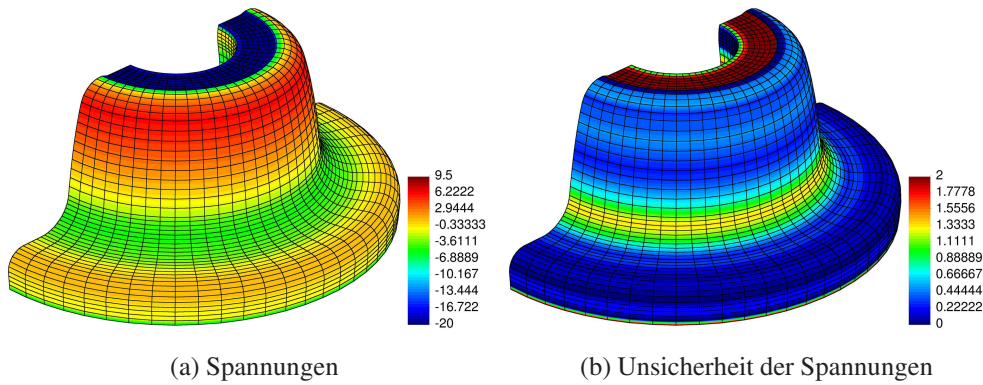
Abbildung 7.12: Knotenverschiebungen u_z Innen nach Außen

Für die in Abbildung 7.12 dargestellten Verschiebungen in z -Richtung entlang der Kontur I erhält man einen Korrelationskoeffizienten von $\rho_{u_y \Delta u_y}^{II} = -0,589$, es liegt eine leichte Korrelation vor.

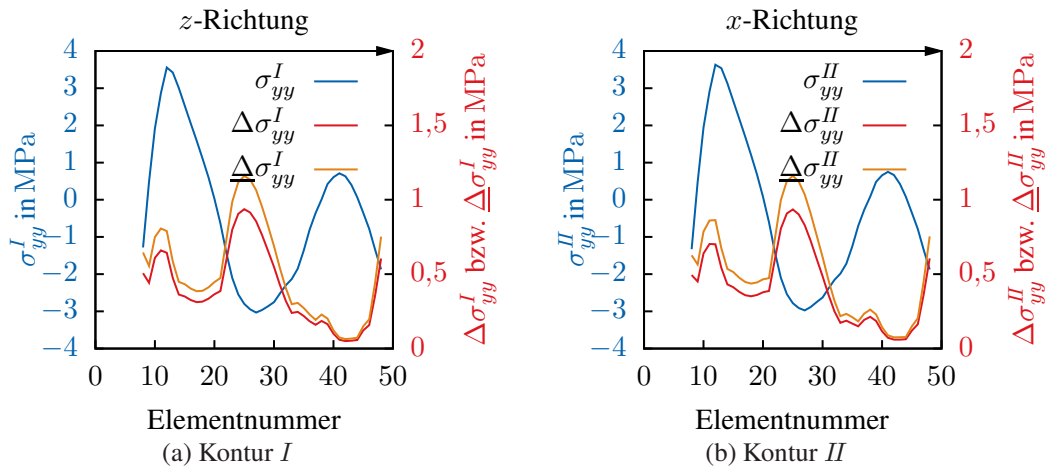
Spannungen Da die Spannungskomponenten nicht exakt an der Kontur berechnet werden, ist es notwendig, diese an den Gauss-Punkten auszuwerten. Mit Kenntnis der Koordinaten aller Gauss-Punkte werden diejenigen Gauss-Punkte ausgewählt, welche am nächsten zur jeweiligen Kontur liegen. Da jedes Element genau 8 Gauss-Punkte enthält, werden bei der Kontur II jeweils die zwei nächsten Gauss-Punkte herangezogen, während bei Kontur I der Mittelwert aus den jeweils zwei mal zwei gegenüberliegenden Punkten berechnet wird. Die resultierenden Werte gelten daher streng genommen nicht für die Kontur, da sie etwas im Inneren des Körpers liegen. Da allerdings gravierende Abweichungen bei der Untersuchung der Unsicherheiten nicht zu erwarten sind, wird im Folgenden sprachlich nicht immer zwischen der genauen Kontur und den exakten Koordinaten der Gauss-Punkte unterschieden.

In Abbildung 7.13 ist die Spannungsverteilung der Spannungen σ_{yy} in MPa dargestellt. Da auf den Elementen zwischen den Knoten 1 bis 7 die Verschiebungsrandbedingungen aufgebracht werden, tritt an Knoten 7 eine Singularität auf. Da eine Betrachtung dieser Bereiche deshalb nicht sinnvoll ist, erfolgt die Darstellung in den nachfolgenden Diagrammen nur für einen Bereich nach Knoten 7 (vgl. Abbildung 7.9).

⁷Eine Korrelation zwischen einem Wert und dem ihm zugehörigen absoluten Fehler deutet an, dass dieser Fehler auch mit steigenden Werten größer wird. Was plausibel erscheint, muss aber keineswegs zwangsläufig so sein. Für eine negative Korrelation ist es möglich, dass der absolute Fehler mit steigenden Werten abnimmt.


Abbildung 7.13: Spannungen σ_{yy} in MPa

Dementsprechend beginnt die grafische Darstellung entlang Kontur *I* und Kontur *II* bei der Elementnummer 7. In Abbildung 7.14 sind die Spannungen in *y*-Richtung dargestellt.


Abbildung 7.14: Spannungen σ_{yy} von Innen nach Außen

Hinsichtlich der Nutzung der Kovarianzmatrix zeigt sich in diesem Fall, dass $\Delta\sigma_{yy}$ meist 22 – 28 % größer als $\Delta\sigma_{yy}$ ist. Dabei ist keine Korrelation zwischen den Spannungen und ihren Unsicherheiten erkennbar. Diese Korrelationskoeffizienten entlang der Konturen ergeben sich zu $\rho_{\sigma_{yy}^I \Delta\sigma_{yy}^I} = -0,444$ bzw. $\rho_{\sigma_{yy}^{II} \Delta\sigma_{yy}^{II}} = -0,346$, was bei Überprüfung durch einen *t*-Test keine sichere Korrelation zeigt.

2. Stufe

Im zweiten Teil der Belastung wird der Abstandshalter um $u_x = 3$ mm geschert. In dieser Stufe soll besonders das Verhalten in Scherrichtung untersucht werden. Dazu werden

sowohl die Knotenverschiebungen in x - und in y -Richtung entlang der Konturen sowie die Scherspannungen τ_{xy} sowie τ_{zx} untersucht.

Verschiebungen Stellt man die Knotenverschiebungen in x - und y -Richtung dar, so erhält man die in Abbildung 7.15 und Abbildung 7.17 dargestellten Verläufe. Auch an dieser Stelle fällt auf, dass die Unsicherheiten bei Nutzung der gesamten Kovarianzmatrix $\check{\mathbf{C}}_\kappa$ geringere Werte annehmen als beim Ignorieren der Nebendiagonalelemente.

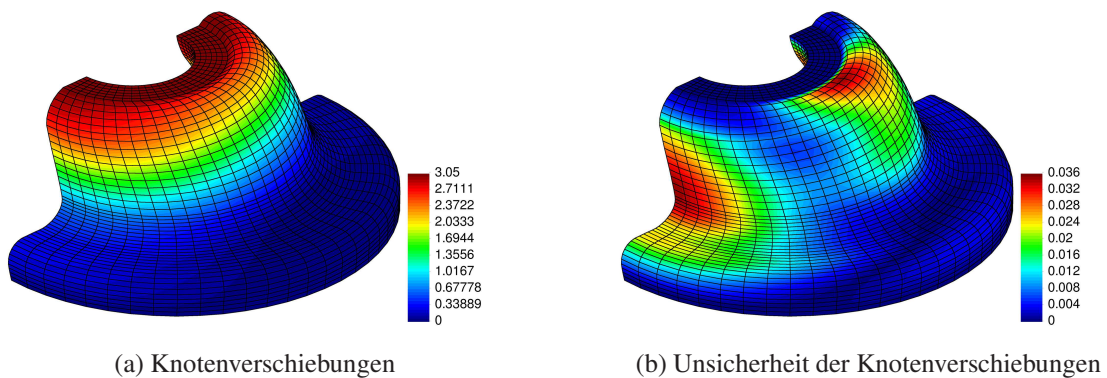


Abbildung 7.15: Knotenverschiebungen u_x in mm

Betrachtet man die gesamte Verteilung auf der Geometrie, so sticht die unterschiedliche Verteilung der Verschiebungen und deren Unsicherheiten sofort ins Auge. Dies zeigt deutlich, dass besonders bei komplexen Geometrien eine Faustformel der Art, dass sich die Verteilung der Fehler proportional zur untersuchten Größe verhält, nicht anwendbar ist. Das entsprechende Verhalten erkennt man auch in den Darstellungen entlang der zwei Konturen.

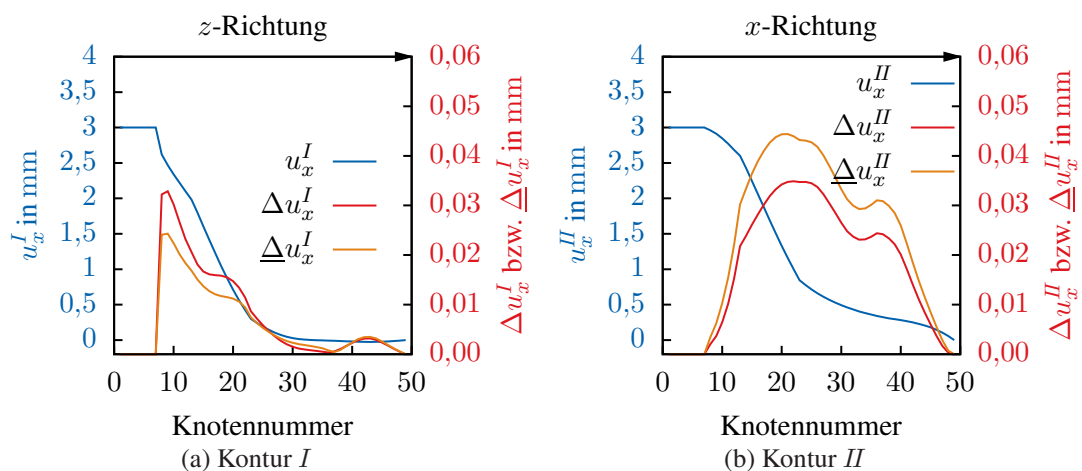


Abbildung 7.16: Knotenverschiebung u_x von Innen nach Außen

Entlang der Konturen *I* und *II* ist entsprechend dem *t*-Test keine Korrelation zu erkennen, was auch an den entsprechenden Korrelationskoeffizienten $\rho_{u_x \Delta u_x}^I = 0,387$ und $\rho_{u_x \Delta u_x}^{II} = -0,379$ erkennbar ist.

Die Knotenverschiebungen der zweiten Stufe in *y*-Richtung werden in Abbildung 7.17 dargestellt. Die konkreten Werte entlang der zwei untersuchten Konturen sieht man in Abbildung 7.18. Auch in der zweiten Stufe des Belastungsprozesses kann man keine

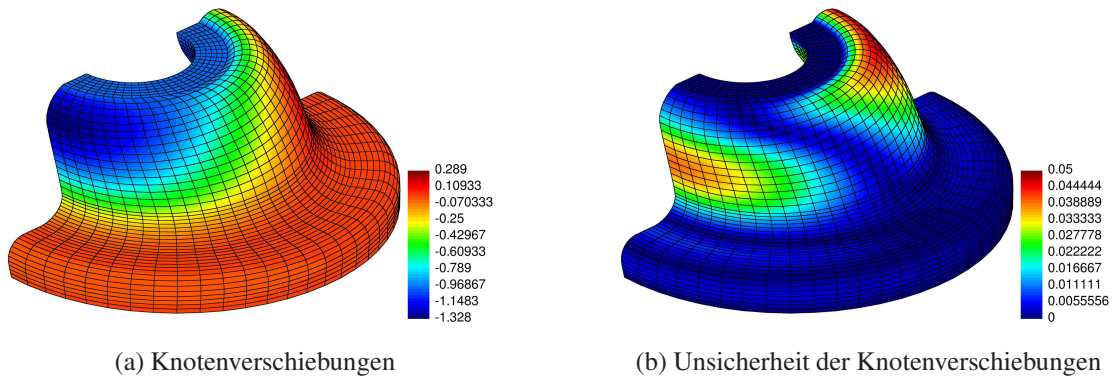


Abbildung 7.17: Knotenverschiebungen u_y in mm

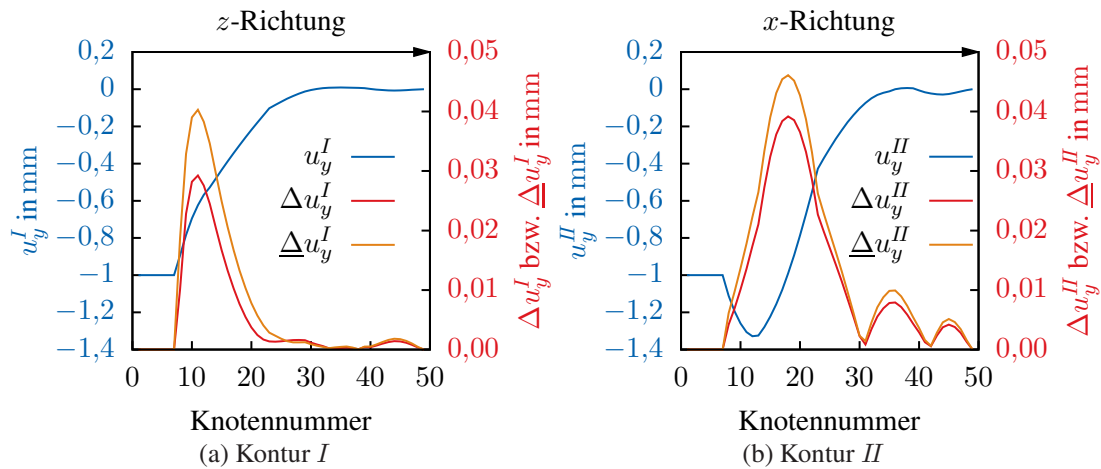


Abbildung 7.18: Knotenverschiebung u_y von Innen nach Außen

sichere Korrelation erkennen, die Korrelationskoeffizienten für die Konturen betragen $\rho_{u_y \Delta u_y}^I = -0,347$ und $\rho_{u_y \Delta u_y}^{II} = -0,433$.

Spannungen Analog zur ersten Stufe werden die Spannungen erst ab dem 7. Knoten untersucht. Im diesem zweiten Teil der Belastung handelt es sich um eine Scherung in *x*-Richtung. Aus diesem Grund werden die Scherspannungen τ_{xy} sowie τ_{zx} untersucht,

die entsprechenden Simulationsergebnisse sind in Abbildung 7.19 und Abbildung 7.21 dargestellt.

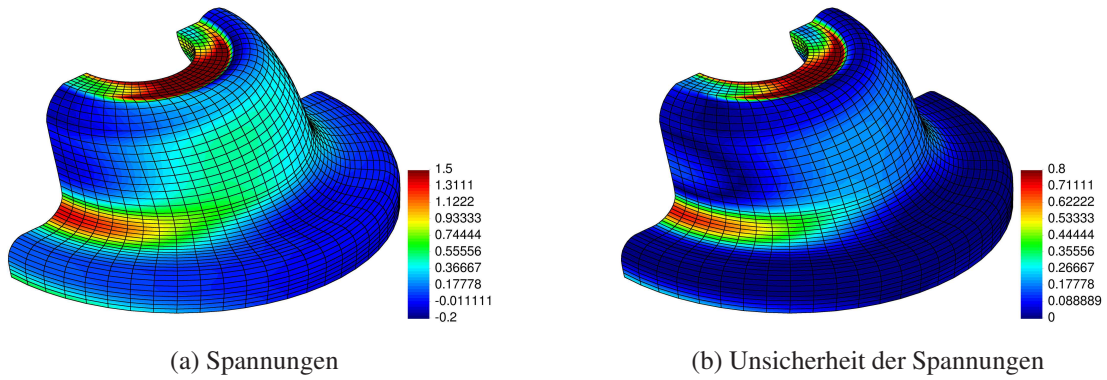


Abbildung 7.19: Scherspannungen τ_{xy} in MPa

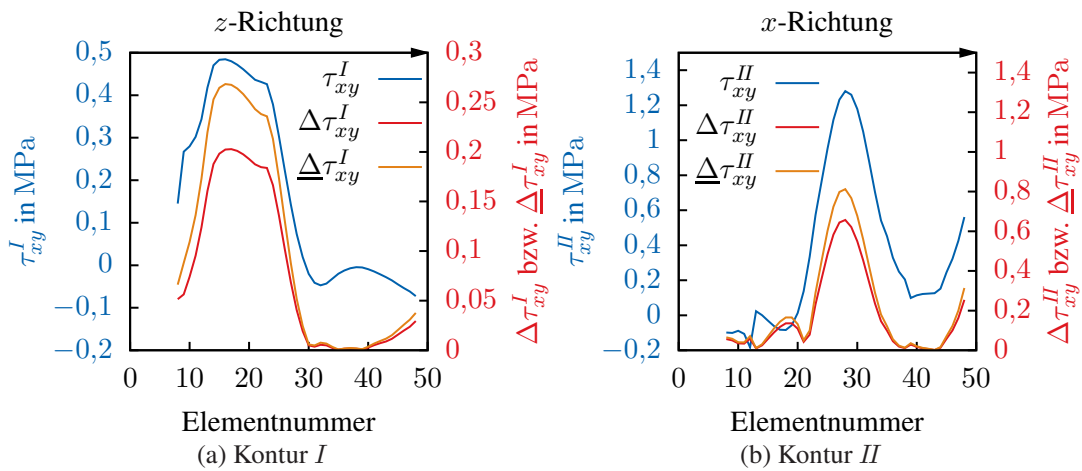
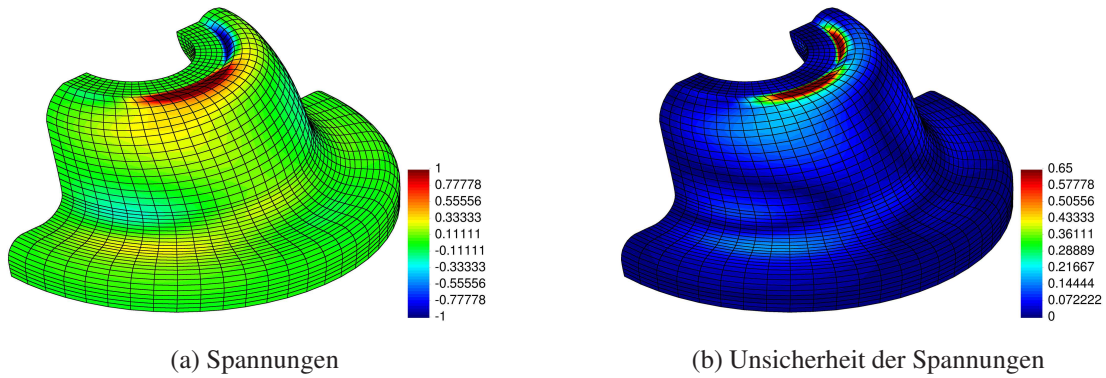
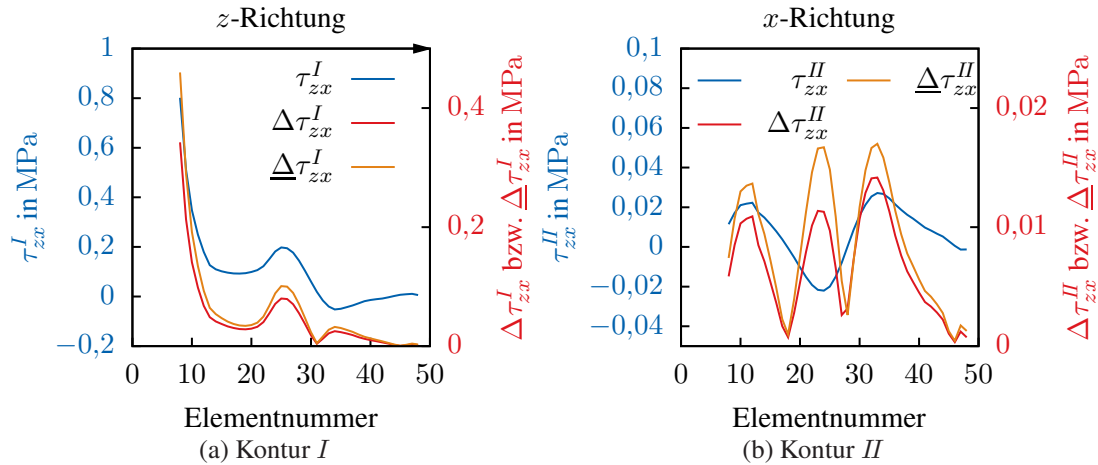


Abbildung 7.20: Scherspannungen τ_{xy} von Innen nach Außen

Im Bereich der Spannungen τ_{xy} ist die Korrelation zwischen den Spannungen und deren Unsicherheiten deutlich größer, sie erreicht einen Wert $\rho_{\tau_{xy}\Delta\tau_{xy}}^I = 0,982$ von im Mittenbereich und am Rand einen Wert von $\rho_{\tau_{xy}\Delta\tau_{xy}}^{II} = 0,915$. Dies wird neben den Abbildungen zum Abstandshalter auch an den Werten entlang der Konturen deutlich, vgl. Abbildung 7.20.


Abbildung 7.21: Scherspannungen τ_{zx} in MPa

Für die Scherspannungen τ_{zx} ergeben sich Korrelationskoeffizienten von $\rho_{\tau_{zx}\Delta\tau_{zx}}^I = 0,996$ und $\rho_{\tau_{zx}\Delta\tau_{zx}}^{II} = 0,339$. In z -Richtung liegt eine eindeutige Korrelation vor zwischen τ_{zx} und deren Unsicherheit $\Delta\tau_{zx}$, während in x -Richtung keine Korrelation erkennbar ist, vgl. Abbildung 7.22.


Abbildung 7.22: Scherspannungen τ_{zx} von Innen nach Außen

Zusammenfassung

Es zeigt sich, dass der Einfluss der Unsicherheiten vielfältig ist. Interessant zu sehen ist, wie die geringen Streuungen in den Materialparametern $\Delta c_{10}/c_{10} = 0,043\%$ bzw. $\Delta\alpha/\alpha = 0,013\%$ eine große Bandbreite an Streuung hinsichtlich der untersuchten Verschiebungen und Spannungen erzeugen. Dabei ist es wenig sinnvoll, die Schwankungen in Form von relativen Unsicherheiten (z.B. $\Delta\tau_{xy}/\tau_{xy}$) anzugeben, da diese besonders empfindlich auf kleine Werte (z.B. in den Spannungen τ_{xy}) selbst reagieren und so lokal

extrem hohe Werte erzeugen. Diese sind für die Zielstellung der Berechnung eines Bauteils nicht wichtig, da selbst mit großen relativen Unsicherheiten versehene kleine Spannungen weiterhin klein bleiben. Interessant sind im praktischen Zusammenhang die Bereiche, wo konsistent hohe Spannungen auftreten. Diese treten zumeist korreliert mit den hohen, ihnen zugehörigen, Unsicherheiten auf. Betrachtet man z.B. Abbildung 7.22a so erkennt man, dass die relativen Unsicherheiten im Bereich der maximalen Spannungen bis zu 44 % betragen, was im Hinblick auf die geringe Streuung der zugrundeliegenden Materialparameter nicht absehbar war.

Die Spannungen und Verschiebungen verhalten sich nicht einheitlich. Während bei den Spannungen häufig eine Korrelation mit ihren Unsicherheiten erkennbar ist, ist dies bei den Verschiebungen nicht der Fall. Dies wird besonders bei Betrachtung der Korrelationskoeffizienten deutlich.

Die Unterschiede zwischen einer vollständig besetzten Kovarianzmatrix und einer reinen Diagonalmatrix sind quantitativ deutlich sichtbar, qualitativ hingegen zeigen beide Varianten den gleichen Verlauf. Gerade in den Bereichen großer Unsicherheiten hat die vollständig besetzte Kovarianzmatrix signifikanten Einfluss und sollte, wenn möglich, stets für die Fehlerfortpflanzung genutzt werden.

7.3 Lineare Viskoelastizität

7.3.1 1D-Formulierung

Die lineare Viskoelastizität eignet sich, um bestimmte Vorgehensweisen zu analysieren. Sie wurde in der Vergangenheit ausgiebig untersucht. Basierend auf der Elastizitätstheorie (siehe z.B. (Treloar, 1943) oder (James und Guth, 1943)) haben Green und Tobolsky (1946) diese Theorie um viskose Effekte erweitert, welche später um die Aufspaltung der freien Energie in einen ratenunabhängigen und einen ratenabhängigen Anteil von Lubliner (1985) erweitert wurde. Anwendung findet die lineare Viskoelastizität u.a. in (Coleman und Noll, 1961), (Crochet und Naghdi, 1969) oder (Lubliner, 1985). Aus der dreidimensionalen Formulierung der linearen Viskoelastizität kann eine analytische Lösung für den einaxialen Zug abgeleitet werden. Rheologische Modelle bieten sich aufgrund ihrer einfachen Verständlichkeit an, um die grundlegenden elastischen und viskosen Eigenschaften eines Materials auf nachvollziehbare Weise zu beschreiben. Im Falle der linearen Viskoelastizität verwendet man eine Kombination aus einem Feder- und einem Dämpferelement und erhält so das sogenannte 3-Parameter Modell, siehe Abbildung 7.23. Die gesamte Dehnung ε kann in elastische ε_e und viskose Dehnungen ε_v zerlegt werden.

$$\varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_v \quad (7.46)$$

Aus einem Freischnitt resultiert das Kräftegleichgewicht, welches bei Annahme einer Einheitsfläche über die Spannungen formuliert werden kann. Die Gesamtspannung σ

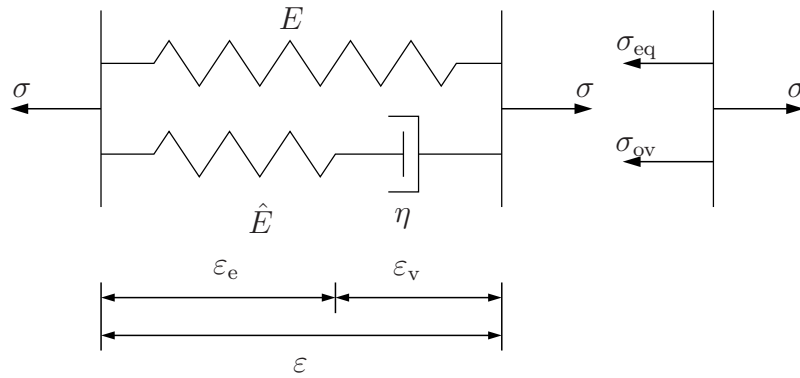


Abbildung 7.23: Rheologisches Drei-Parametermodell der Viskoelastizität

wird dabei zerlegt in die Gleichgewichtsspannung σ_{eq} und die Überspannung σ_{ov}

$$\sigma = \sigma_{eq} + \sigma_{ov}. \quad (7.47)$$

Durch konstitutive Gleichungen wird jedem rheologischen Teilmodell eine Materialeigenschaft zugewiesen

$$\sigma_{eq} = E\varepsilon, \quad \sigma_{ov} = \hat{E}\varepsilon_e, \quad \sigma_{ov} = \eta\dot{\varepsilon}_v. \quad (7.48)$$

Zusammengeführt bilden die Gleichungen (7.46), (7.47) und (7.48)

$$\sigma = \sigma_{eq} + \sigma_{ov} = E\varepsilon + \hat{E}\varepsilon_e = E\varepsilon + \hat{E}(\varepsilon - \varepsilon_v) \quad (7.49)$$

sowie die zugehörige Zeitableitung

$$\dot{\sigma} = E\dot{\varepsilon} + \hat{E}(\dot{\varepsilon} - \dot{\varepsilon}_v). \quad (7.50)$$

Die Gleichungen (7.49) und (7.50) können in eine gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung überführt werden. Dazu wird der dritte Teil von Gleichung (7.48) nach

$$\dot{\varepsilon}_v = \frac{\sigma_{ov}}{\eta} = \frac{\sigma - \sigma_{eq}}{\eta} = \frac{1}{\eta}(\sigma - E\varepsilon) \quad (7.51)$$

umgeformt und Gleichung (7.51) in Gleichung (7.49) eingesetzt. Es resultiert die gewöhnliche Differentialgleichung

$$\dot{\sigma}(t) + \frac{\hat{E}}{\eta}\sigma(t) = (E + \hat{E})\dot{\varepsilon}(t) + \frac{E\hat{E}}{\eta}\varepsilon(t). \quad (7.52)$$

Gleichung (7.52) lässt sich mit gegebenen Anfangsbedingungen lösen. Dabei ist sowohl ein dehnungsgesteuerter (ε und $\dot{\varepsilon}$ vorgegeben) als auch ein spannungsgesteuerter (σ und $\dot{\sigma}$ vorgegeben) Versuch denkbar.

7.3.2 Einaxialer Zug - analytische Lösung (1D)

Die nächste Zielsetzung im Hinblick auf die Untersuchung zu den Unsicherheiten der Materialparameter ist die Reduktion der dreidimensionalen Gleichungen auf den einaxialen Zug. Dies erfolgt durch Einsetzen und Zusammenfassen der entsprechenden Gleichungen. Für den einaxialen Zug gilt:

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} \varepsilon & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_q & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_q \end{bmatrix}, \quad \text{Sp } \mathbf{E} = \varepsilon + 2\varepsilon_q, \quad \mathbf{E}^D = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2\varepsilon - 2\varepsilon_q & 0 & 0 \\ 0 & \varepsilon_q - \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_q - \varepsilon \end{bmatrix}, \quad (7.53)$$

$$\dot{\mathbf{E}} = \begin{bmatrix} \dot{\varepsilon} & 0 & 0 \\ 0 & \dot{\varepsilon}_q & 0 \\ 0 & 0 & \dot{\varepsilon}_q \end{bmatrix}, \quad \text{Sp } \dot{\mathbf{E}} = \dot{\varepsilon} + 2\dot{\varepsilon}_q, \quad \dot{\mathbf{E}}^D = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2\dot{\varepsilon} - 2\dot{\varepsilon}_q & 0 & 0 \\ 0 & \dot{\varepsilon}_q - \dot{\varepsilon} & 0 \\ 0 & 0 & \dot{\varepsilon}_q - \dot{\varepsilon} \end{bmatrix}, \quad (7.54)$$

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} \sigma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{Sp } \mathbf{T} = \sigma, \quad \mathbf{T}^D = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2\sigma & 0 & 0 \\ 0 & -\sigma & 0 \\ 0 & 0 & -\sigma \end{bmatrix}, \quad (7.55)$$

$$\dot{\mathbf{T}} = \begin{bmatrix} \dot{\sigma} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \text{Sp } \dot{\mathbf{T}} = \dot{\sigma}, \quad \dot{\mathbf{T}}^D = \frac{1}{3} \begin{bmatrix} 2\dot{\sigma} & 0 & 0 \\ 0 & -\dot{\sigma} & 0 \\ 0 & 0 & -\dot{\sigma} \end{bmatrix}. \quad (7.56)$$

Lastpfad Im Folgenden soll von dem konkreten Prozess des einaxialen Zuges ausgegangen werden. Hierzu wird ein dehnungskontrollierter Versuch gewählt, d.h. ε und $\dot{\varepsilon}$ sind vorgegeben. Der konkrete Lastpfad ist in Abbildung 7.24 dargestellt. Die Dehnung und Dehnungsgeschwindigkeit ist somit vorgegeben und kann geschrieben werden als

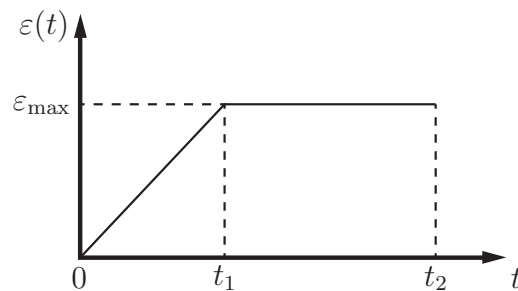


Abbildung 7.24: Lastpfadbeispiel des einaxialen Zuges mit anschließender Haltezeit

$$\varepsilon(t) = \begin{cases} \frac{\varepsilon_{\max}}{t_1} t & \text{für } t < t_1 \\ \varepsilon_{\max} & \text{für } t \geq t_1 \end{cases} \quad \dot{\varepsilon}(t) = \begin{cases} \frac{\varepsilon_{\max}}{t_1} & \text{für } t < t_1 \\ 0 & \text{für } t \geq t_1 \end{cases}. \quad (7.57)$$

Setzt man den dehnungsgesteuerten Prozess (7.57) in Gleichung (7.52) ein, so erhält man im Bereich I:

$$\dot{\sigma}(t) + \frac{\hat{E}}{\eta}\sigma(t) = (E + \hat{E})\frac{\varepsilon_{\max}}{t_1} + \frac{E\hat{E}}{\eta}\frac{\varepsilon_{\max}}{t_1}t \quad (7.58)$$

Für den Bereich II ergibt sich:

$$\dot{\sigma}(t) + \frac{\hat{E}}{\eta}\sigma(t) = \frac{E\hat{E}}{\eta}\varepsilon_{\max} \quad (7.59)$$

Lösung der Differentialgleichung

Bei Gleichung (7.52) handelt es sich um eine lineare gewöhnliche Differentialgleichung erster Ordnung, die mit Hilfe der Variation der Konstanten gelöst werden kann. Die Gesamtlösung σ setzt sich aus der homogenen σ_h und der partikulären Lösung σ_p zusammen

$$\sigma = \sigma_h + \sigma_p. \quad (7.60)$$

Mit den Anfangs- und Übergangsbedingungen

$$\sigma_I(t=0) = 0, \quad (7.61)$$

$$\sigma_I(t=t_1) = \sigma_{II}(t=t_1) \quad (7.62)$$

erhält man als geschlossene Lösung

$$\sigma(t) = \begin{cases} \frac{\varepsilon_{\max}}{t_1}\eta \left(1 - e^{-\frac{\hat{E}}{\eta}t}\right) + E\varepsilon_{\max}\frac{t}{t_1} \\ -\frac{\varepsilon_{\max}}{t_1}\eta \left(1 - e^{-\frac{\hat{E}}{\eta}t_1}\right) e^{-\frac{\hat{E}}{\eta}t} + E\varepsilon_{\max}. \end{cases} \quad (7.63)$$

Eine genaue Herleitung dazu ist u.a. in (Hartmann, 2012) angegeben.

7.3.3 3D-Formulierung

Eine mögliche Erweiterung (vgl. (Hartmann, 2005)) der linearen Viskoelastizität auf drei Dimensionen orientiert sich dabei an der Vorgehensweise der eindimensionalen Formulierung. So werden die Spannungen \mathbf{T} ebenfalls in Gleichgewichtsspannungen \mathbf{T}_{eq} und Überspannungen \mathbf{T}_{ov} und die Dehnungen \mathbf{E} in elastische Dehnungen \mathbf{E}_e und viskose Dehnungen \mathbf{E}_v zerlegt

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_{eq} + \mathbf{T}_{ov} \quad \text{und} \quad \mathbf{E} = \mathbf{E}_e + \mathbf{E}_v. \quad (7.64)$$

Die Gleichgewichtsspannungen werden durch

$$\mathbf{T}_{eq} = K(\text{Sp } \mathbf{E})\mathbf{1} + 2G\mathbf{E}^D \quad (7.65)$$

sowie die Überspannungen durch

$$\mathbf{T}_{\text{ov}} = 2\hat{G}(\mathbf{E}^D - \mathbf{E}_v^D) \quad (7.66)$$

beschrieben. Die auftretenden Materialparameter sind der Kompressionsmodul K und Schubmodul G des Gleichgewichtszustandes sowie der Schubmodul \hat{G} der Überspannungen. Die inneren Variablen sind die viskosen Verzerrungen \mathbf{E}_v , welche durch die Evolutionsgleichungen

$$\dot{\mathbf{E}}_v = \frac{1}{\eta} \mathbf{T}_{\text{ov}} = \frac{2\hat{G}}{\eta} (\mathbf{E}^D - \mathbf{E}_v^D). \quad (7.67)$$

beschrieben werden. Die Viskosität η wird dabei durch

$$\eta = \eta_0 e^{-s_0 \|\mathbf{T}_{\text{ov}}\|} \quad (7.68)$$

definiert.

7.3.4 Einaxialer Zug - analytische Lösung (3D)

Ausgehend von dem DAE-System

$$\mathbf{T} = K(\text{Sp } \mathbf{E}) \mathbf{1} + 2G\mathbf{E}^D + 2\hat{G}(\mathbf{E}^D - \mathbf{E}_v^D) \quad (7.69)$$

$$\dot{\mathbf{E}}_v = \frac{1}{\eta} \mathbf{T}_{\text{ov}} = \frac{2\hat{G}}{\eta} (\mathbf{E}^D - \mathbf{E}_v^D). \quad (7.70)$$

ist das Ziel, die unbekannten viskosen Verzerrungen zu eliminieren. Mit Bildung der Zeitableitung von Gleichung (7.69)

$$\dot{\mathbf{T}} = K(\text{Sp } \dot{\mathbf{E}}) \mathbf{1} + 2G\dot{\mathbf{E}}^D + 2\hat{G}(\dot{\mathbf{E}}^D - \dot{\mathbf{E}}_v^D) \quad (7.71)$$

und dem deviatorischen Anteil von Gleichung (7.70)

$$\dot{\mathbf{E}}_v^D = 2\frac{\hat{G}}{\eta} (\mathbf{E}^D - \mathbf{E}_v^D), \quad (7.72)$$

kann die unbekannte Zeitableitung $\dot{\mathbf{E}}_v$ in Gleichung (7.71) eliminiert werden, d.h.

$$\dot{\mathbf{T}} = K(\text{Sp } \dot{\mathbf{E}}) \mathbf{1} + 2(G + \hat{G})\dot{\mathbf{E}}^D - \frac{4\hat{G}^2}{\eta} (\mathbf{E}^D - \mathbf{E}_v^D). \quad (7.73)$$

Umstellen nach \mathbf{E}_v^D liefert

$$\mathbf{E}_v^D = \frac{\eta}{4\hat{G}^2} \left(-K(\text{Sp } \dot{\mathbf{E}}) \mathbf{1} - 2(G + \hat{G})\dot{\mathbf{E}}^D + \frac{4\hat{G}^2}{\eta} \mathbf{E}^D + \dot{\mathbf{T}} \right). \quad (7.74)$$

Dieser Anteil wird in Gleichung (7.69) eingesetzt

$$\begin{aligned} \mathbf{T} &= K(\text{Sp } \mathbf{E})\mathbf{1} + 2(G + \hat{G})\mathbf{E}^D + \frac{\eta}{2\hat{G}}K(\text{Sp } \dot{\mathbf{E}})\mathbf{1} \\ &\quad + \frac{\eta}{\hat{G}}(G + \hat{G})\dot{\mathbf{E}}^D - 2\hat{G}\mathbf{E}^D - \frac{\eta}{2\hat{G}}\dot{\mathbf{T}} \\ \mathbf{T} + \frac{\eta}{2\hat{G}}\dot{\mathbf{T}} &= K(\text{Sp } \mathbf{E})\mathbf{1} + 2G\mathbf{E}^D + \frac{\eta}{2\hat{G}}K(\text{Sp } \dot{\mathbf{E}})\mathbf{1} + \frac{\eta}{\hat{G}}(G + \hat{G})\dot{\mathbf{E}}^D \end{aligned} \quad (7.75)$$

und liefert mit den Gleichungen (7.53)-(7.56) des einaxialen Zuges das System von Differentialgleichungen

$$\begin{aligned} \sigma + \frac{\eta}{2\hat{G}}\dot{\sigma} &= K(\varepsilon + 2\varepsilon_q) + \frac{4}{3}G(\varepsilon - \varepsilon_q) \\ &\quad + \frac{\eta}{2\hat{G}}K(\dot{\varepsilon} + 2\dot{\varepsilon}_q) + \frac{2}{3}\frac{\eta}{\hat{G}}(G + \hat{G})(\dot{\varepsilon} - \dot{\varepsilon}_q) \end{aligned} \quad (7.76)$$

$$\begin{aligned} 0 &= K(\varepsilon + 2\varepsilon_q) - \frac{2}{3}G(\varepsilon - \varepsilon_q) + \frac{\eta}{2\hat{G}}K(\dot{\varepsilon} + 2\dot{\varepsilon}_q) \\ &\quad - \frac{1}{3}\frac{\eta}{\hat{G}}(G + \hat{G})(\dot{\varepsilon} - \dot{\varepsilon}_q). \end{aligned} \quad (7.77)$$

Nun ist es Zielsetzung, aus Gleichung (7.77) die Unbekannte ε_q zu bestimmen. Durch Umsortieren erkennt man die Struktur einer linearen gewöhnlichen Differentialgleichung erster Ordnung

$$\dot{\varepsilon}_q + \frac{\hat{G}}{\eta} \frac{(2K + \frac{2}{3}G)}{K + \frac{1}{3}(G + \hat{G})} \varepsilon_q = - \frac{\frac{1}{2}K - \frac{1}{3}(G + \hat{G})}{K + \frac{1}{3}(G + \hat{G})} \dot{\varepsilon} - \frac{\hat{G}}{\eta} \frac{K - \frac{2}{3}G}{K + \frac{1}{3}(G + \hat{G})} \varepsilon \quad (7.78)$$

bzw. die Modellstruktur

$$\dot{\varepsilon}_q(t) + \alpha \varepsilon_q(t) = \beta(t). \quad (7.79)$$

Zur kürzeren Schreibweise werden die folgenden Konstanten

$$\alpha = \frac{\hat{G}}{\eta} \frac{(2K + \frac{2}{3}G)}{K + \frac{1}{3}(G + \hat{G})} \quad (7.80)$$

$$\beta(t) = \beta_1 \dot{\varepsilon}(t) + \beta_2 \varepsilon(t), \quad \beta_1 = - \frac{\frac{1}{2}K - \frac{1}{3}(G + \hat{G})}{K + \frac{1}{3}(G + \hat{G})}, \quad \beta_2 = - \frac{\hat{G}}{\eta} \frac{K - \frac{2}{3}G}{K + \frac{1}{3}(G + \hat{G})} \quad (7.81)$$

definiert.

Lösung der Differentialgleichung

Die Lösung der Differentialgleichung setzt sich aus der homogenen und der partikulären Lösung zusammen.

$$\varepsilon_q = \varepsilon_{q,h} + \varepsilon_{q,p}. \quad (7.82)$$

Die homogene Lösung erhält man erneut durch den Exponentialansatz

$$\varepsilon_{q,h} = \overline{C} e^{-\alpha t} \quad (7.83)$$

Bei C handelt es sich um eine Integrationskonstante, die erst durch den konkreten Prozess festgelegt ist. Die partikuläre Lösung berechnet sich mit Hilfe der Methode der Variation der Konstanten. Dafür wird davon ausgegangen, dass die Integrationskonstante C eine Funktion der Zeit t ist.

$$\varepsilon_q = C(t) e^{-\alpha t} \quad \rightarrow \quad \dot{\varepsilon}_q = -\alpha C(t) e^{-\alpha t} + \dot{C}(t) e^{-\alpha t} \quad (7.84)$$

Einsetzen von Gleichung (7.84) in Gleichung (7.79) liefert

$$-\alpha C(t) e^{-\alpha t} + \dot{C}(t) e^{-\alpha t} + \alpha C(t) e^{-\alpha t} = \beta(t) \quad (7.85)$$

$$\dot{C}(t) e^{-\alpha t} = \beta_1 \dot{\varepsilon}(t) + \beta_2 \varepsilon(t) \quad (7.86)$$

Gleichung (7.86) löst man für beide Bereiche durch Integration.

Bereich I ($t \leq t_1$):

$$C_I(t) = \frac{\varepsilon_{\max}}{t_1} \int \beta_1 e^{\alpha t} + \beta_2 t e^{\alpha t} dt \quad (7.87)$$

$$= \frac{\varepsilon_{\max}}{t_1} \frac{\beta_1}{\alpha} e^{\alpha t} + \frac{\varepsilon_{\max}}{t_1} \frac{1}{\alpha} \beta_2 \left(t - \frac{1}{\alpha} \right) e^{\alpha t} + \tilde{C}_I \quad (7.88)$$

Bereich II ($t > t_1$)

$$C_{II}(t) = \int \beta_2 \varepsilon_{\max} e^{\alpha t} dt = \frac{\varepsilon_{\max}}{\alpha} \beta_2 e^{\alpha t} + \tilde{C}_{II} \quad (7.89)$$

Damit gilt für die partikuläre Lösung von ε_q

$$\varepsilon_q = \begin{cases} \overline{C}_I e^{-\alpha t} + C_I e^{-\alpha t} & \text{für } t \leq t_1 \\ \overline{C}_{II} e^{-\alpha t} + C_{II} e^{-\alpha t} & \text{für } t > t_1 \end{cases} \quad (7.90)$$

mit $\hat{C}_I = \overline{C}_I + \tilde{C}_I$ bzw. $\hat{C}_{II} = \overline{C}_{II} + \tilde{C}_{II}$ folgt

$$\varepsilon_q(t) = \begin{cases} \hat{C}_I e^{-\alpha t} + \frac{\varepsilon_{\max}}{\alpha t_1} \beta_1 + \frac{\varepsilon_{\max}}{\alpha t_1} \beta_2 \left(t - \frac{1}{\alpha} \right) & \text{für } t \leq t_1 \\ \hat{C}_{II} e^{-\alpha t} + \frac{\varepsilon_{\max}}{\alpha} \beta_2 & \text{für } t > t_1 \end{cases} \quad (7.91)$$

In den Integrationskonstanten \hat{C}_I und \hat{C}_{II} sind auch die Integrationskonstanten \tilde{C}_I und \tilde{C}_{II} enthalten. Zudem müssen diese noch bestimmt werden. Dazu setzt man die Anfangsbedingungen von ε_q ein. Da zu Beginn des Versuchs die Querdehnung identisch Null ist gilt $\varepsilon_q(0) = 0$. Bei $t = t_1$ gilt als Übergangsbedingung $\varepsilon_{qI}(t_1) = \varepsilon_{qII}(t_1)$. Es folgt für die Integrationskonstanten

$$\hat{C}_I = \frac{\varepsilon_{\max}}{\alpha^2 t_1} (\beta_2 - \alpha \beta_1) \quad (7.92)$$

$$\hat{C}_{II} = \frac{\varepsilon_{\max}}{\alpha^2 t_1} ((\beta_2 - \alpha \beta_1)(e^{-\alpha t_1} - 1)) e^{\alpha t_1} \quad (7.93)$$

Einsetzen in Gleichung (7.91) liefert schließlich:

$$\varepsilon_q = \begin{cases} \frac{\varepsilon_{\max}}{\alpha^2 t_1} (\beta_2 - \alpha \beta_1)(e^{-\alpha t} - 1) + \frac{\varepsilon_{\max}}{\alpha} \frac{t}{t_1} \beta_2 & \text{für } t \leq t_1 \\ \frac{\varepsilon_{\max}}{\alpha^2 t_1} (\beta_2 - \alpha \beta_1)(1 - e^{\alpha t_1}) e^{-\alpha t} + \frac{\varepsilon_{\max}}{\alpha} \beta_2 & \text{für } t > t_1 \end{cases} \quad (7.94)$$

Die bekannte Querdehnung ε_q kann man nun in Gleichung (7.76) einsetzen und erhält eine Differentialgleichung für die Spannung σ , die man auf analoge Weise lösen kann:

$$\begin{aligned} \dot{\sigma} + \frac{2\hat{G}}{\eta} \sigma &= \frac{2\hat{G}}{\eta} K(\varepsilon + 2\varepsilon_q) + \frac{2\hat{G}}{\eta} \frac{4}{3} G(\varepsilon - \varepsilon_q) \\ &+ K(\dot{\varepsilon} + 2\dot{\varepsilon}_q) + \frac{1}{3}(G + \hat{G})(\dot{\varepsilon} - \dot{\varepsilon}_q) \end{aligned} \quad (7.95)$$

Gleichung (7.95) hat die gleich Struktur wie Gleichung (7.79) und kann entsprechend analog gelöst werden

$$\dot{\sigma} + A\sigma = B(t). \quad (7.96)$$

Dabei gilt

$$A = \frac{2\hat{G}}{\eta} \quad (7.97)$$

$$B(t) = \frac{2\hat{G}}{\eta} \left(K + \frac{4}{3}G \right) \varepsilon(t) + \frac{2\hat{G}}{\eta} \left(2K - \frac{4}{3}G \right) \varepsilon_q(t) \quad (7.98)$$

$$+ \left(K + \frac{4}{3}(G + \hat{G}) \right) \dot{\varepsilon}(t) + \left(2K - \frac{4}{3}(G + \hat{G}) \right) \dot{\varepsilon}_q(t) \quad (7.99)$$

$$= B_1 \varepsilon(t) + B_2 \varepsilon_q(t) + B_3 \dot{\varepsilon}(t) + B_4 \dot{\varepsilon}_q(t) \quad (7.100)$$

Die genaue Herleitung ist etwas länglich und wird aus Platzgründen an dieser Stelle nicht ausgeführt. Als Randbedingung muss auch hier gelten $\sigma_I(t_1) = \sigma_{II}(t_1)$. Für die beiden Bereiche folgt

$$\sigma_I(t) = \frac{9}{2} \frac{\varepsilon_{\max}}{t_1} \frac{K}{(G+3K)^2} \left(2G(G+3K)t + 3K\eta \left(1 - e^{-2\hat{G} \frac{(G+3K)}{(G+G+3K)} \frac{t}{\eta}} \right) \right) \quad (7.101)$$

und

$$\sigma_{II}(t) = \frac{9}{2} \frac{\varepsilon_{\max}}{t_1} \frac{K}{(G+3K)^2} \left(2G(G+3K)e^{2\hat{G} \frac{(G+3K)}{(G+G+3K)} \frac{t}{\eta}} + 3K\eta \left(e^{2\hat{G} \frac{(G+3K)}{(G+G+3K)} \frac{t_1}{\eta}} \right) \right) e^{-2\hat{G} \frac{(G+3K)}{(G+G+3K)} \frac{t}{\eta}}. \quad (7.102)$$

Die Lösung (7.101) wird nun mit den Materialparametern E und ν anstelle von G und K formuliert, d.h.

$$G = \frac{E}{2(1+\nu)}, \quad \hat{G} = \frac{\hat{E}}{2(1+\hat{\nu})}, \quad K = \frac{E}{3(1-2\nu)} \quad (7.103)$$

$$\sigma_I(t) = \frac{\varepsilon_{\max}}{t_1} Et + \eta \frac{2}{3} \frac{\varepsilon_{\max}}{t_1} (1+\nu)^2 \left(1 - e^{-\frac{3E\hat{E}}{3E(1+\hat{\nu}) - \hat{E}(2\nu^2+\nu-1)} \frac{t}{\eta}} \right). \quad (7.104)$$

Zum Vergleich mit der Lösung des 3-Parameter-Modells wird $\nu = 1/2$ gesetzt, da das 3-Parameter-Modell keinerlei Kompressibilität berücksichtigen kann, das betrachtete Material muss in diesem Fall also querdehnungsfrei sein. Ebenfalls kann angenommen werden, dass $\hat{\nu} = 0$ gilt. Damit gilt

$$\sigma_I(t) = E \frac{\varepsilon_{\max}}{t_1} t + \frac{3}{2} \eta \frac{\varepsilon_{\max}}{t_1} \left(1 - e^{-\hat{E} \frac{t}{\eta}} \right) \quad (7.105)$$

und analog aus Gleichung (7.101)

$$\sigma_{II}(t) = E\varepsilon_{\max} + \frac{3}{2} \eta \frac{\varepsilon_{\max}}{t_1} \left(e^{\hat{E} \frac{t_1}{\eta}} - 1 \right) e^{-\frac{\hat{E}}{\eta} t}. \quad (7.106)$$

7.3.5 Sensitivität

Die Sensitivitätsanalyse wird in der Art durchgeführt, dass mit Hilfe der Ableitungen von Gleichung (7.105) und Gleichung (7.106) die Sensitivität hinsichtlich der Material-

parameter berechnet wird. Diese ergeben sich zu

$$\frac{d\sigma_I}{dE} = \varepsilon_{\max} \frac{t}{t_1} \quad (7.107)$$

$$\frac{d\sigma_I}{d\hat{E}} = \frac{3}{2} \varepsilon_{\max} \frac{t}{t_1} e^{-\hat{E} \frac{t}{\eta}} \quad (7.108)$$

$$\frac{d\sigma_I}{d\eta} = \frac{3}{2} \frac{\varepsilon_{\max}}{t_1} \left(1 - e^{-\hat{E} \frac{t}{\eta}} \left(1 + \frac{\hat{E} t}{\eta} \right) \right). \quad (7.109)$$

Für die Formulierung nach Gleichung (7.101) und (7.102) ergibt sich als analytische Lösung für die Sensitivität:

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma_I}{dK} = \varepsilon_{\max} \frac{9}{2t_1(G+3K)^3} & \left(2G^2t(G+3K) + 6GK\eta \right. \\ & \left. + \frac{2}{(\hat{G}+G+3K)^2} \left(9\hat{G}^2K^2t(G+3K) - 3GK\eta(\hat{G}+G+3K)^2 \right) e^{-2\hat{G} \frac{(G+3K)}{(\hat{G}+G+3K)} \frac{t}{\eta}} \right) \end{aligned} \quad (7.110)$$

$$\frac{d\sigma_I}{dG} = \frac{27K}{(G+3K)^2} \frac{\varepsilon_{\max}}{t_1} \left(t \left(\frac{\hat{G}^2}{(\hat{G}+G+3K)^2} e^{-2\hat{G} \frac{(G+3K)}{(\hat{G}+G+3K)} \frac{t}{\eta}} + 1 \right) \right. \quad (7.111)$$

$$\left. + \frac{2\eta}{G+3K} \left(e^{-2\hat{G} \frac{(G+3K)}{(\hat{G}+G+3K)} \frac{t}{\eta}} - 1 \right) \right) \quad (7.112)$$

$$\frac{d\sigma_I}{d\hat{G}} = \varepsilon_{\max} \frac{27K^2}{(\hat{G}+G+3K)^2} \frac{t}{t_1} e^{-2\hat{G} \frac{(G+3K)}{(\hat{G}+G+3K)} \frac{t}{\eta}} \quad (7.113)$$

Es ist erkennbar, dass die Sensitivitäten hinsichtlich bestimmter Parameter sehr unterschiedlich sind. So ist die Sensitivität bezogen auf das Elastizitätsmodul E von keinem weiteren Materialparametern abhängig und umgekehrt hängen die Sensitivitäten der beiden anderen Parameter \hat{E} und η nicht von dem Elastizitätsmodul ab, was aufgrund der Gleichungsstruktur nachvollziehbar ist. Zudem ist erkennbar, wie unterschiedlich die Komplexität der Ableitungen ist, je nach Formulierung ($\kappa^T = \{E, \hat{E}, \nu, \hat{\nu}\}$ bzw. $\kappa^T = \{K, \hat{G}, G\}$).

7.3.6 Vergleich der reduzierten Lösungen

Beim Vergleich der Gleichungen (7.105) und (7.106) mit der eindimensional motivierten Lösung (7.63) fällt auf, dass diese nicht identisch sind. Der prinzipielle Verlauf und die grundlegende Struktur sind gleich, allerdings unterscheiden sich beide Lösungen um einen Faktor $3/2$ im zweiten Summanden. Diese Tatsache ist in Abbildung 7.25 beispielhaft für $E = 5 \text{ MPa}$, $\hat{E} = 10 \text{ MPa}$ sowie $\eta = 10 \text{ MPa s}$ dargestellt.

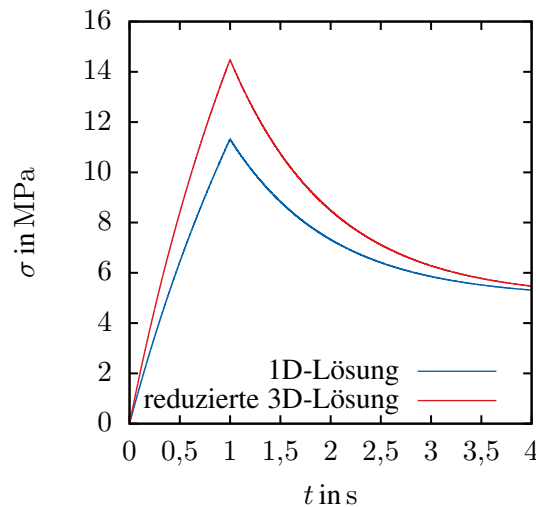


Abbildung 7.25: Vergleich der Lösungen

Schon bei einem sehr einfachen Beispiel weicht die Lösung der eindimensional formulierten Lösung von der dreidimensionalen Lösung signifikant ab. Daher ist es notwendig, für eine Identifikation von Materialparametern stets mit genau dem konstitutiven Modell durchzuführen, für dessen Anwendung die Parameter gedacht sind. Eine Übertragung von Parametern auf ein ähnliches Modell ist nicht zu empfehlen, insbesondere deshalb weil die Art und Größe der Abweichung nicht abschätzbar ist.

7.4 Sensitivitätsanalyse der Viskoelastizität

Die im vorhergehenden Abschnitt hergeleiteten Gleichungen können nun genutzt werden um in Analogie zu Abschnitt 7.2 eine Reidentifikation der Materialparameter durchzuführen. Die Vorgehensweise bei der Generierung der Ausgangsdaten entspricht dabei derselben Vorgehensweise wie in Abschnitt 7.2. Dazu werden die Gleichungen (7.69) und (7.70) mit Hilfe der in Abschnitt 6.3 vorgestellten Vorgehensweise zeitlich diskretisiert und gelöst. Diese Diskretisierung erfolgt in Zeitschritten von $\Delta t = 0,01 \text{ s}$ mit Hilfe des Backward-Euler Verfahrens. Mit Hilfe eines solchen ursprünglichen Datensatzes (vgl. Abbildung 7.26). Dieser Datensatz wird sowohl für die Identifikation mit Hilfe numerischer Methoden als auch für die Identifikation mit Hilfe der analytischen Lösung verwendet.

Da die Identifikation des Parameters K zu einer singulären Jacobi-Matrix führt, wird dieser Parameter für die Identifikation nicht berücksichtigt. Die weiteren Parameter be-

sitzen die Werte

$$\begin{aligned} G^{\text{init}} &= 350 \text{ MPa}, \\ \hat{G}^{\text{init}} &= 5000 \text{ MPa}, \\ \eta^{\text{init}} &= 1000. \end{aligned} \quad (7.114)$$

Mit den Parametern $\kappa^{\text{init}} = \{G^{\text{init}}, \hat{G}^{\text{init}}, \eta^{\text{init}}\}^T$ und dem festen Parameter $K = 100 \text{ MPa}$ führt eine zu Abschnitt 7.2.1 äquivalente Vorgehensweise auf die in Abbildung 7.26 dargestellte Verteilung.

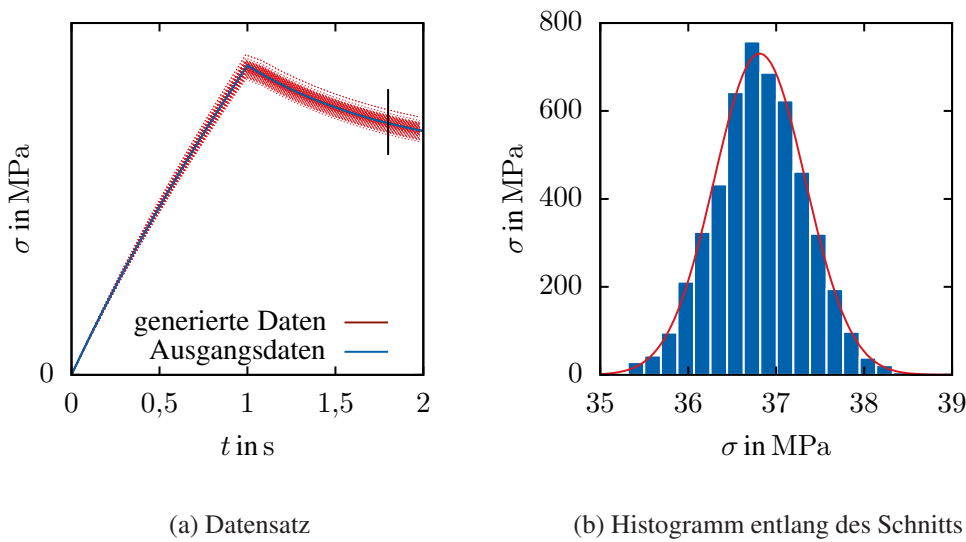


Abbildung 7.26: Vollständiger Datensatz zur Reidentifikation der Viskoelastizität

Für die Startwerte $\kappa^{(0)}$ für die einzelnen Identifikationen wurden hier die Werte

$$\begin{aligned} G^{(0)} &= 850 \text{ MPa}, \\ \hat{G}^{(0)} &= 1000 \text{ MPa}, \\ \eta^{(0)} &= 100 \end{aligned} \quad (7.115)$$

gewählt.

7.4.1 Identifikation mit Hilfe der analytischen Lösung

Zuerst wird in Analogie zum Abschnitt 7.2.2 die Identifikation der einzelnen Datensätze durchgeführt, um die Verteilung der ermittelten Parameter $\kappa^T = \{G, \hat{G}, \eta\}$ zu erhalten. Dazu wird ein Trust-Region-Algorithmus des Softwarepakets *MATLAB*⁸ verwendet.

⁸Es handelt sich vornehmlich um die Routine *lsqnonlin*. Siehe auch (Coleman und Li, 1996)

Die analytische Lösung (7.101) und (7.102) des Problems liefert dabei die für den Optimierungsalgorithmus nötigen Werte $\sigma(t)$. Bei der Identifikation wurden die Parameter insofern beschränkt, dass sie für alle Komponenten $|\kappa_i| \geq 0$ gilt.

Einzelidentifikation

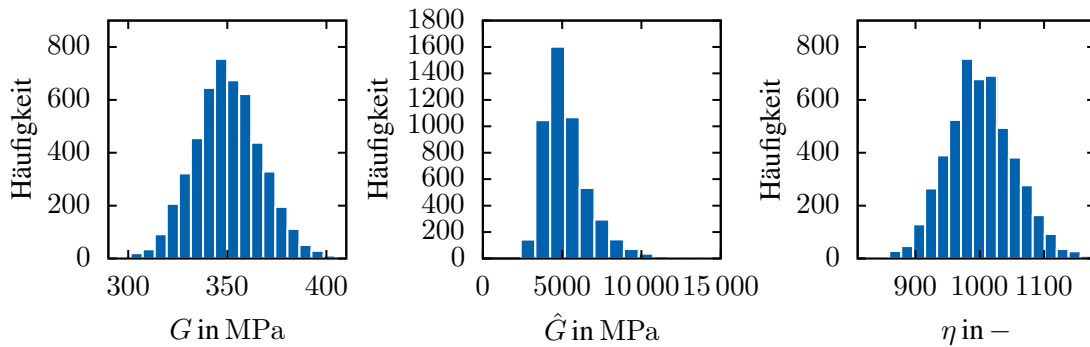


Abbildung 7.27: Häufigkeitsverteilung der identifizierten Materialparameter

In Abbildung 7.27 ist zu erkennen, dass die identifizierten Parameter κ^* die initial gewählten Parameter κ^{init} gut wiedergeben. Die Verteilung der Parameter zeigt in zwei von drei Fällen eine klare Normalverteilung. Bei der Verteilung von \hat{G} ist keine Normalverteilung erkennbar, vielmehr erkennt man die rechte Flanke einer solchen Verteilung, welche einen Mittelwert in der Nähe von $\hat{G}^{\text{init}} = 5000$ MPa aufweist. Dieses Verhalten überrascht nicht, da für die Parameter während der Identifikation keine Werte kleiner Null zugelassen werden. Die erkennbare Verteilung deutet aber an, dass genau diese Beschränkung der Grund für eine Abweichung von der Normalverteilung ist. Weiterhin ist die relative Unsicherheit des Parameters \hat{G} mit $\Delta\hat{G}/\hat{G} \approx 31\%$ größer als die relativen Unsicherheiten der beiden anderen Parameter ($\Delta G/G \approx 5\%$ bzw. $\Delta\eta/\eta \approx 5\%$).

Für die zugehörigen Korrelationskoeffizienten ergeben sich die in Abbildung 7.28 dargestellten Verteilungen. Grundsätzlich erkennt man an den Korrelationskoeffizien-

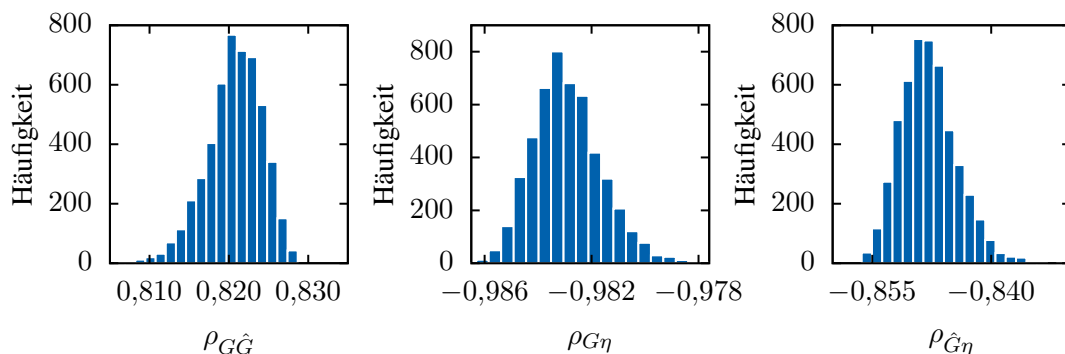


Abbildung 7.28: Häufigkeitsverteilung der Korrelationskoeffizienten

ten, dass sich alle Parameter untereinander in ihrer Wirkung beeinflussen, was wegen der zugrundeliegenden Gleichungsstruktur nicht überrascht. Sie haben im Mittel die Werte $\bar{\rho}_{G\hat{G}} = 0,821$, $\bar{\rho}_{G\eta} = -0,983$ sowie $\bar{\rho}_{\hat{G}\eta} = -0,848$. Der zugehörige t -Test bestätigt die statistische Signifikanz aller Korrelationen. Zwischen dem Schubmodul G und der Viskosität η ist eine deutliche negative Korrelation zu erkennen. Mit Blick auf die Gleichungen (7.101) und (7.102) ist zwar ein Zusammenhang erkennbar, allerdings ist nicht ersichtlich, warum gerade die Korrelation zwischen G und η größer als die anderen Korrelationen ist.

Bei der Nutzung des aller Daten für eine gleichzeitige Optimierung ergeben sich die in Tabelle 7.3 dargestellten Werte. Dabei beträgt der Determinationskoeffizient $R = 0,997$ und die Korrelationskoeffizienten besitzen die Werte $\rho_{G\hat{G}} = 0,821$, $\rho_{G\eta} = -0,983$ sowie $\rho_{\hat{G}\eta} = -0,848$.

Tabelle 7.3: Identifizierte Werte mit der analytischen Lösung

	Optimierung					
	einzelner Versuche			aller Versuche		
	\bar{G}/MPa	$\bar{\hat{G}}/\text{MPa}$	$\bar{\eta}/\text{MPa}$	G/MPa	\hat{G}/MPa	η/MPa
Startwert	350,00	5000,00	1000,00	350,00	5000,00	1000,00
identifizierter Wert	350,23	5327,68	1001,35	349,79	4983,96	999,32
Vertrauensbereich	16,94	(1638,38)	52,17	7,42	306,00	176,43

Der Optimierungsalgorithmus liefert in beiden Fällen die ursprünglichen Parameter. Damit liegt die identifizierte Lösung sehr gut innerhalb der erzeugten Daten (vgl. Abbildung 7.29). Der Grund für die hohen Unsicherheiten bei der Einzelidentifikation insbesondere für den Parameter \hat{G} liegt an der Tatsache, dass die berechneten Verteilung keiner Normalverteilung folgt. Man erhält zwar für jede einzelne Identifikation einen Wert für deren einzelnen Vertrauensbereich, allerdings ist es unsinnig, aus diesen allen den Mittelwert zu bilden. Anstelle dessen wird zur Bestimmung des Vertrauensbereichs eine Normalverteilung an die erhaltene Verteilung angefitet, welche neben dem Mittelwert auch die Standardabweichung und damit den Vertrauensbereich wiedergibt. Da die Verteilung des Parameters \hat{G} deutlich keiner Normalverteilung mehr folgt, ist die Standardabweichung bei einem solchen Fit entsprechend groß und kann nicht als gesicherte Aussage gelten. Um dies zu verdeutlichen, werden die entsprechenden Werte in Tabelle 7.3 in Klammern gesetzt.

7.4.2 Identifikation mit Hilfe numerischer Methoden

In diesem Abschnitt wird die Reidentifikation der Daten mit Hilfe einer numerischen Lösung des Problems durchgeführt. Die Zeitschrittweite beträgt dabei wie bei der Erstel-

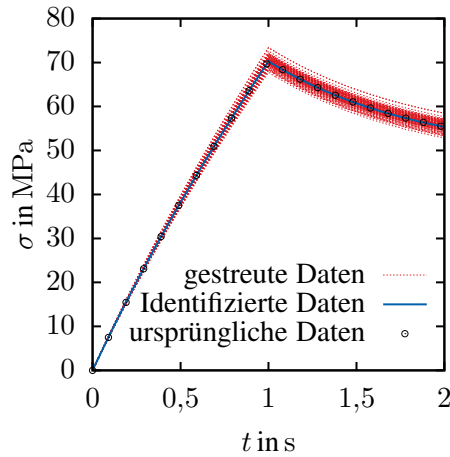


Abbildung 7.29: Ergebnis der Identifikation mit analytischer Lösung

lung des zu identifizierenden Datensatzes ebenfalls $\Delta t = 0.01$ s. Der zugrundeliegende Datensatz ist identisch mit dem der analytischen Identifikation und es wird wieder der oben genannte Trust-Region-Algorithmus verwendet.

Einzelidentifikation

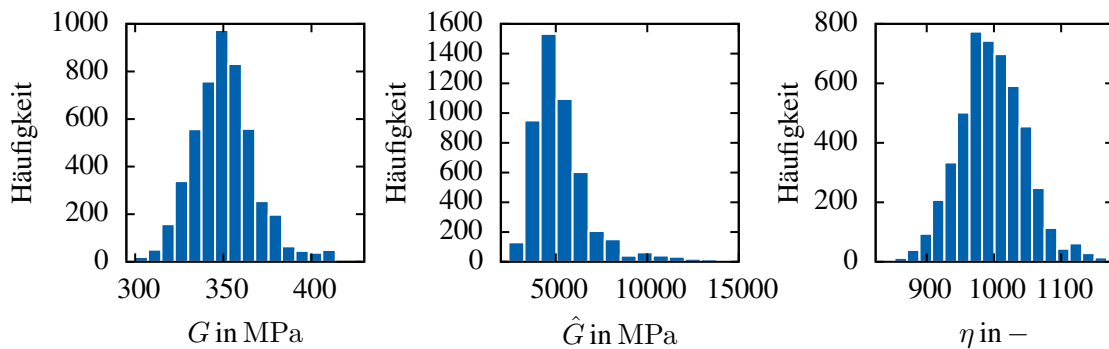


Abbildung 7.30: Häufigkeitsverteilung der identifizierten Materialparameter

In Abbildung 7.30 erkennt man die ermittelten Verteilungen der Materialparameter. Die Verteilung der Parameter entspricht in keinem Fall klar einer Normalverteilung. Trotz dessen liegt das Häufigkeitsmaximum jedes Parameters in Nahe der Ausgangsparameter $\kappa^{(0)}$. Die Vertrauensbereiche aus der Einzelidentifikation können berechnet werden, indem eine Normalverteilung an die Verteilung des jeweiligen Parameters gefittet wird. So erhält man deren Mittelwert und den Vertrauensbereich. Diese sind in der Tabelle 7.4 in Klammern angegeben, da ihre Aussagekraft gering ist, schließlich kann

keine Normalverteilung an die entsprechenden Werte angefitet werden. Die Korrelationskoeffizienten besitzen in diesem Fall die Werte $\bar{\rho}_{G\hat{G}} = 0,820$, $\bar{\rho}_{G\eta} = -0,986$ sowie $\bar{\rho}_{\hat{G}\eta} = -0,847$. Entsprechend eines t -Tests sind alle Korrelationen signifikant.

Im Vergleich zur Identifikation mit der analytischen Lösung folgen die Verteilungen weniger deutlich mit einer Normalverteilung. Der Effekt, dass die Verteilung von \hat{G} einen unsymmetrischen Verlauf zeigt, ist in beiden Fällen erkennbar und folgt, wie schon zuvor erwähnt, aus der unteren Grenze für den Parameter bei der Identifikation.

Gesamte Identifikation

Bei Nutzung aller 5000 Datensätze für eine gleichzeitige Identifikation erhält man die in Tabelle 7.4 dargestellten Ergebnisse. Diese entsprechen der erwarteten Größenordnung. Sie stimmen gut mit dem Mittelwert der zuvor bestimmten Verteilungen für die einzelnen Parameter überein.

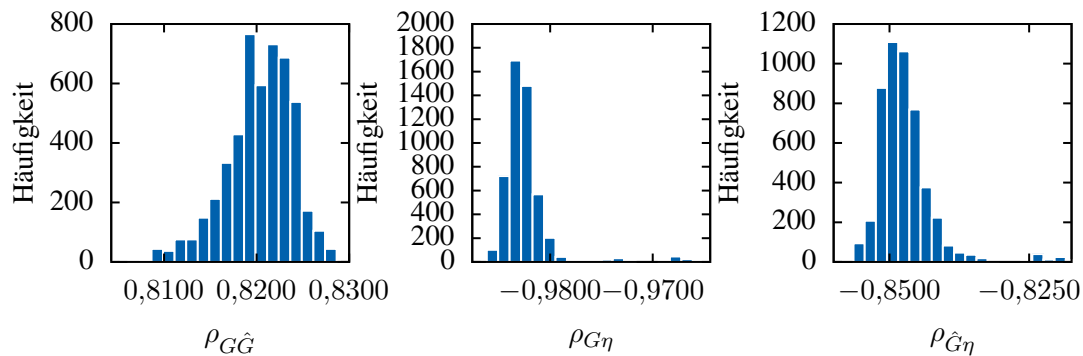


Abbildung 7.31: Häufigkeitsverteilung der Korrelationskoeffizienten

Tabelle 7.4: Identifizierte Werte mit der analytischen Lösung

	Optimierung					
	einzelner Versuche			aller Versuche		
	\bar{G}/MPa	$\bar{\hat{G}}/\text{MPa}$	$\bar{\eta}/\text{MPa}$	G/MPa	\hat{G}/MPa	η/MPa
Startwert	350,00	5000,00	1000,00	350,00	5000,00	1000,00
identifizierter Wert	351,71	5480,21	997,246	349,87	4990,051	999,56
Vertrauensbereich	(20,70)	(2279,83)	(49,45)	0,57	21,91	1,25

Die Korrelationen bestehen allen den t -Test und zeigen eine starke Antikorrelation zwischen G und η ($\rho_{G\eta} = -0,985$). Die Korrelationen zwischen G und \hat{G} sowie zwischen \hat{G} und η erreichen dabei die Werte $\rho_{G\hat{G}} = 0,819$ bzw. $\rho_{\hat{G}\eta} = -0,851$. Sie entsprechen in Ihrer Aussage der mit Hilfe der analytischen Lösung gefundenen Korrelationen,

besitzen allerdings geringfügig unterschiedliche Werte. Weiterhin gibt die identifizierte Lösung den ursprünglichen Datensatz ebenfalls gut wieder (siehe Tabelle 7.32).

Fazit Es ist erkennbar, dass die in der numerischen Lösung durch die Zeitdiskretisierung entstehenden Fehler, bei entsprechender kleinen Zeitschritten keinen nennenswerten Einfluss auf das Ergebnis der Verteilung der Materialparameter besitzen. Die numerische Identifikation liefert dabei kleinere Vertrauensbereiche als die der analytischen Identifikation. Dies ist insofern zu erwarten, als das die zu identifizierenden Daten mit Hilfe der numerischen Lösung erzeugt wurden. In Tabelle 7.32 sind die Ergebnisse dargestellt.

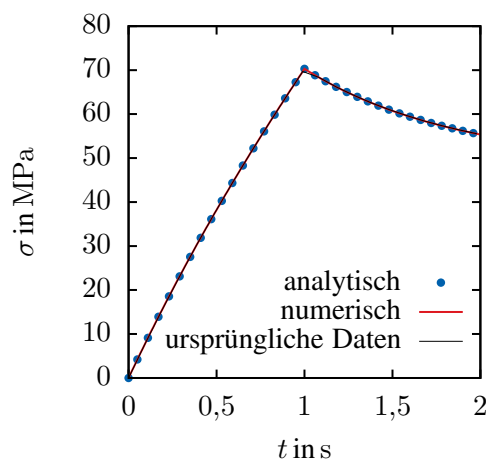


Abbildung 7.32: Vergleich der Ergebnisse der vollständigen Identifikation

7.5 Viskoplastizität

Im folgenden Kapitel soll die Parameteridentifikation mit anschließender Sensitivitätsanalyse und Diskussion anhand eines viskoplastischen Materials durchgeführt werden. Dazu wird ein bestehendes Materialmodell verwendet, um reale Messdaten von 51CrV4-Stahl zur Optimierung heranzuziehen. Im Anschluss daran sollen die erhaltenen Werte und Unsicherheiten in der Simulation eines Rohrs unter Innendruck untersucht werden.

7.5.1 Materialmodell

Das verwendete Materialmodell der Viskoplastizität vom Perzyna-Typ (vgl. (Perzyna, 1966) oder (Chaboche, 1977)) wurde in Hartmann et al. (1997) sowie in Hartmann und Haupt (1993) entwickelt. Ein wichtiger Bestandteil davon ist die Fließfunktion

$f = F(\mathbf{T}, \mathbf{X}, k)$, welche von den Überspannungen \mathbf{X} und der Fließspannung k abhängt. Neben der Elastizitätsbeziehung

$$\mathbf{T} = K(\text{Sp } \mathbf{E})\mathbf{1} + 2G(\mathbf{E} - \mathbf{E}_v)^D \quad (7.116)$$

wird die Spannungsantwort durch die Evolutionsgleichungen der inneren Variablen \mathbf{E}_v und \mathbf{X} beschrieben

$$\dot{\mathbf{E}}_v = \frac{1}{\eta} \left\langle \frac{F}{\sigma_0} \right\rangle^r \mathbf{N}, \quad (7.117)$$

$$\dot{\mathbf{X}} = \frac{1}{\eta} \left\langle \frac{F}{\sigma_0} \right\rangle^r \left(c\mathbf{N} - b\sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{X} \right). \quad (7.118)$$

Deren Zeitintegration wird in der hier vorliegenden Arbeit mit Hilfe von DIRK-Verfahren ausgeführt (vgl. Abschnitt 3.3). Um dabei die Vorgehensweise bei der Identifikation der Parameter möglichst nachvollziehbar zu gestalten, wird die isotrope Verfestigung des Modells vernachlässigt. \mathbf{N} ist hierbei die Normale zur Fließfläche

$$F(\mathbf{T}, \mathbf{X}, k) = \frac{1}{2}(\mathbf{T} - \mathbf{X})^D \cdot (\mathbf{T} - \mathbf{X})^D - \frac{1}{3}k^2 \quad (7.119)$$

und ist definiert durch die Gleichung

$$\mathbf{N} = \frac{\frac{d\mathbf{F}}{d\mathbf{T}}}{\left\| \frac{d\mathbf{F}}{d\mathbf{T}} \right\|} \frac{(\mathbf{T} - \mathbf{X})^D}{\|(\mathbf{T} - \mathbf{X})^D\|}. \quad (7.120)$$

Die Fließfunktion (7.119) ist ein entscheidendes Element des betrachteten Modells. Sie beinhaltet eine Fallunterscheidung, die zwischen elastischen und plastischen Deformationen mit Hilfe von Macauley-Klammern unterscheidet. Diese Klammern sind definiert als

$$\langle x \rangle = \begin{cases} 0 & \text{für } x \leq 0 \\ x & \text{für } x > 0. \end{cases} \quad (7.121)$$

Die Materialparameter des Modells sind der Schubmodul G , der Kompressionsmodul K , die Fließspannung k , die Parameter der kinematischen Verfestigung b und c sowie die Viskosität η und deren Exponent r . Die Parameter K und G hängen mit dem Elastizitätsmodul E sowie der Poissonzahl ν zusammen, und können durch diese ausgedrückt werden,

$$G = \frac{E}{2(1 + \nu)}, \quad K = \frac{E}{3(1 - 2\nu)}. \quad (7.122)$$

Damit ergibt sich der Satz der zu bestimmenden Parametern

$$\kappa = \{E, \nu, k, b, c, \eta, r\}^T. \quad (7.123)$$

Da die Wahl von σ_0 den Wert r und damit den grad der Nichtlinearität beeinflusst, wird σ_0 nicht als freier Parameter angesehen. Er dient dazu, eine dimensionslose Größe innerhalb der Macauley-Klammern zu erhalten und beinhaltet grundsätzlich die entsprechende Dimension der Fließfunktion F .

7.5.2 Experimentelle Daten

Zur Identifikation der Materialparameter werden reale Messdaten verwendet, welche (Quint, 2012) entnommen sind. Es handelt sich um Zugversuche an rotationssymmetrischen Stahlproben des Stahls 51CrV4. Aus diesem Satz an verfügbaren Messdaten wurden nur vier Zugversuche und ein mehrstufiger Versuch zur Bestimmung der Gleichgewichtskennlinie verwendet. Die Zugversuche liegen bei variierenden Dehngeschwindigkeiten vor und sind in Abbildung 7.34a dargestellt. Für diese Geschwindigkeiten wurden die Werte $\dot{\varepsilon}_1 \approx 2 \times 10^{-2} \text{ s}^{-1}$, $\dot{\varepsilon}_2 \approx 2 \times 10^{-3} \text{ s}^{-1}$, $\dot{\varepsilon}_3 \approx 2 \times 10^{-4} \text{ s}^{-1}$, $\dot{\varepsilon}_4 \approx 2 \times 10^{-5} \text{ s}^{-1}$ gewählt und die Belastung bis zu einer maximalen Deformation von 4 % vorgenommen, die Belastungspfade sind in Abbildung 7.33 dargestellt.

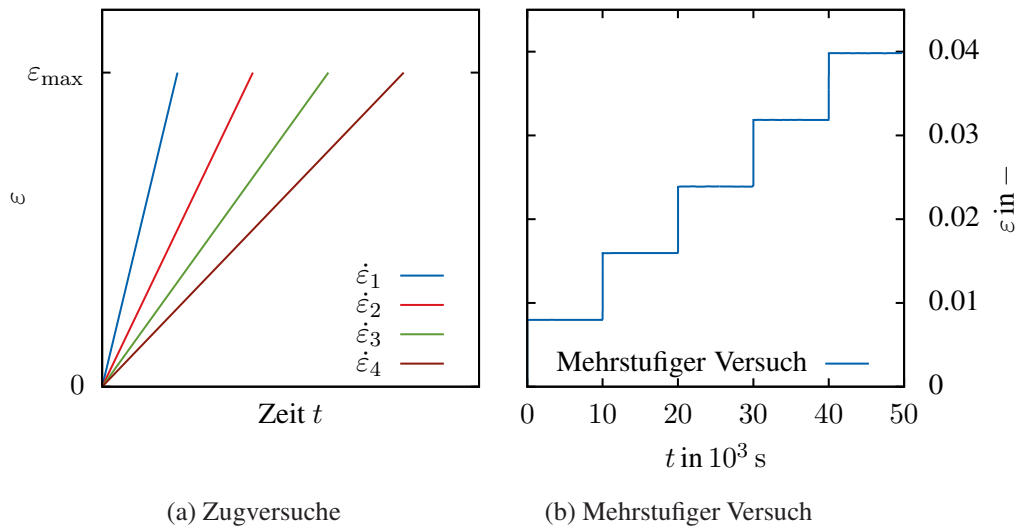


Abbildung 7.33: Belastungspfade der Experimente

Der mehrstufige Versuch besteht aus fünf Belastungsstufen, wobei nach Erreichen der jeweiligen Stufe für $t_{\text{halt}} = 1 \times 10^4 \text{ s}$ die Dehnung konstant gehalten wird. Dabei relaxiert das Material zu seinem Gleichgewichtszustand und man erhält beim Abbruch der Relaxation einen Punkt, welcher auf oder zumindest nahe der Gleichgewichtskurve des

viskoplastischen Materials liegt. Die Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen aus (Quint, 2012) sind in Abbildung 7.34 erkennbar.

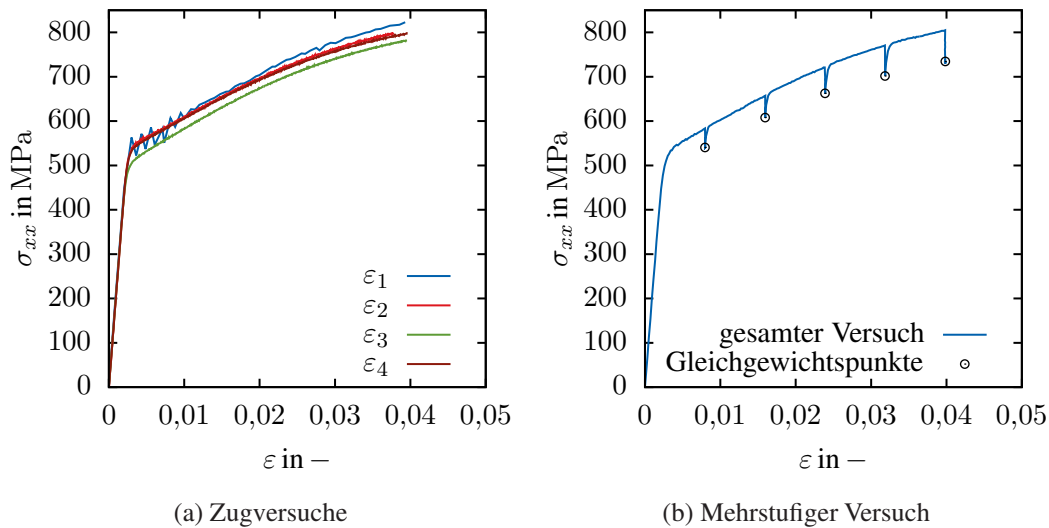


Abbildung 7.34: Experimentelle Daten von 51CrV4-Stahl

7.5.3 Parameteridentifikation

Das Materialmodell mit seinen sieben Materialparametern stellt eine Herausforderung für die Optimierung dieser Parameter dar. Die Natur der Optimierung erlaubt es nicht, einfach alle vorhandenen Experimente zusammen mit dem Modell gleichzeitig zu optimieren. Erwartungsgemäß ist das dadurch entstehende mathematische Problem derart schlecht gestellt, dass der Optimierungsalgorithmus keine brauchbaren Ergebnisse liefert⁹. Daher wird die Optimierung in verschiedene Teilschritte aufgespalten, in denen die einzelnen Parameter bestimmt werden. Der Nachteil dieser Vorgehensweise ist der Verlust einiger Zusammenhänge zwischen verschiedenen Parametern in dem Sinne, dass die Nebendiagonalkomponenten der vollständigen Kovarianzmatrix somit unbestimmt bleiben. Weiterhin besteht keine Möglichkeit aus den vorhandenen experimentellen Datensätzen einen Rückschluss auf die Querkontraktionszahl des untersuchten Stahls zu schließen. Im Allgemeinen bewegt sich diese im Bereich von 0,250 bis 0,340, weshalb ein Wert von $\nu = 0,300$ angenommen wird.

Zur Bestimmung des Elastizitätsmoduls E wurden die Messdaten aller Versuche im elastischen Bereich genutzt. Die Parameter k , b , c , η und r haben keinen Einfluss auf den elastischen Bereich und werden dementsprechend konstant gehalten. Startet man

⁹Bei numerischer Reidentifikation von Mahnen und Stein (1996b) an einem Modell der Viskoplastizität werden keine solchen Probleme erwähnt. Daher wird angenommen, dass die hier beobachteten Schwierigkeiten an der realen Natur der Messdaten liegen.

mit einem Elastizitätsmodul $\kappa_1^{(0)} = E^{(0)} = 217,830 \text{ GPa}$ so liefert die Anwendung des Optimierungsalgorithmus ein Ergebnis von $\kappa_1^* = E^* = (211,646 \pm 0,100) \text{ GPa}$.

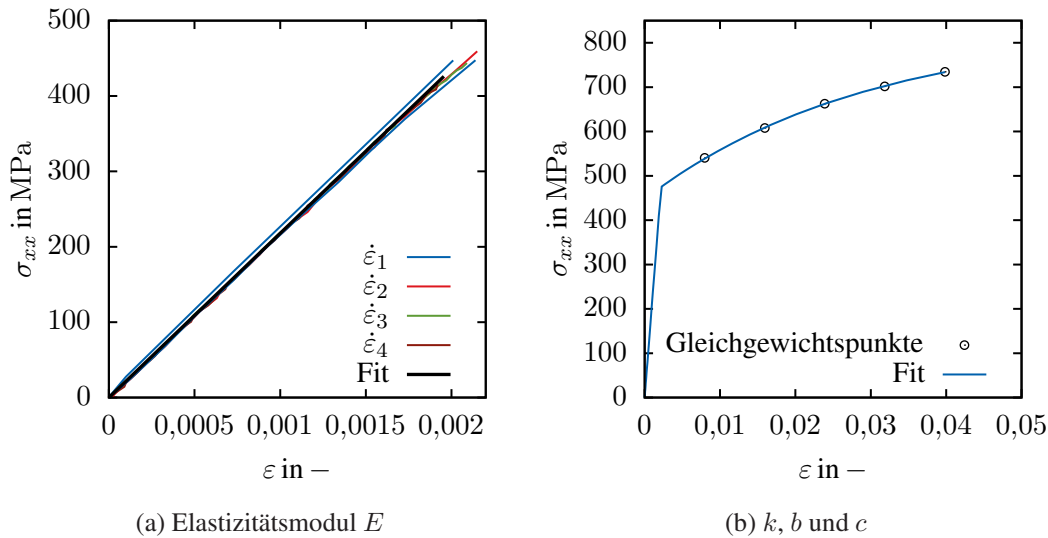


Abbildung 7.35: Parameteridentifikation - Teil 1

Anschließend werden die Relaxationsabbruchpunkte des mehrstufigen Zugversuchs genutzt, um die Parameter b und c der isotropen Verfestigung sowie die Fließspannung k zu bestimmen. Dabei werden ausschließlich die Relaxationsabbruchpunkte genutzt, welche in Abbildung 7.34b als Kreise dargestellt sind. Diesen Gleichgewichtszustand erreicht man anschaulich durch die Vorstellung, dass der Zugversuch mit einer unendlich langsamen Geschwindigkeit durchgeführt wird. Dementsprechend wurden die Parameter $\eta = 0,000$ und $r = 1,000$ festgesetzt um dieses Verhalten zu erzeugen. Mit einem Startvektor von $\kappa_2^{(0)} = \{k, b, c\}^T = \{400, 10, 10\}^T \text{ MPa}$ liefert die Optimierung die Werte, welche zusammengefasst in Tabelle 7.5 dargestellt sind. Weiterhin liefert die

Tabelle 7.5: Identifizierte Werte der geschwindigkeitsabhängigen Plastizität

	k/MPa	b	c/MPa
Startwert	400,000	10,000	10,000
identifizierter Wert	479,972	8136,043	34,101
Vertrauensbereich	1,830	185,000	1,227
Vertrauensbereich (%)	0,381	2,274	3,598

Optimierung als Indikator für den linearen Zusammenhang zwischen den drei Parame-

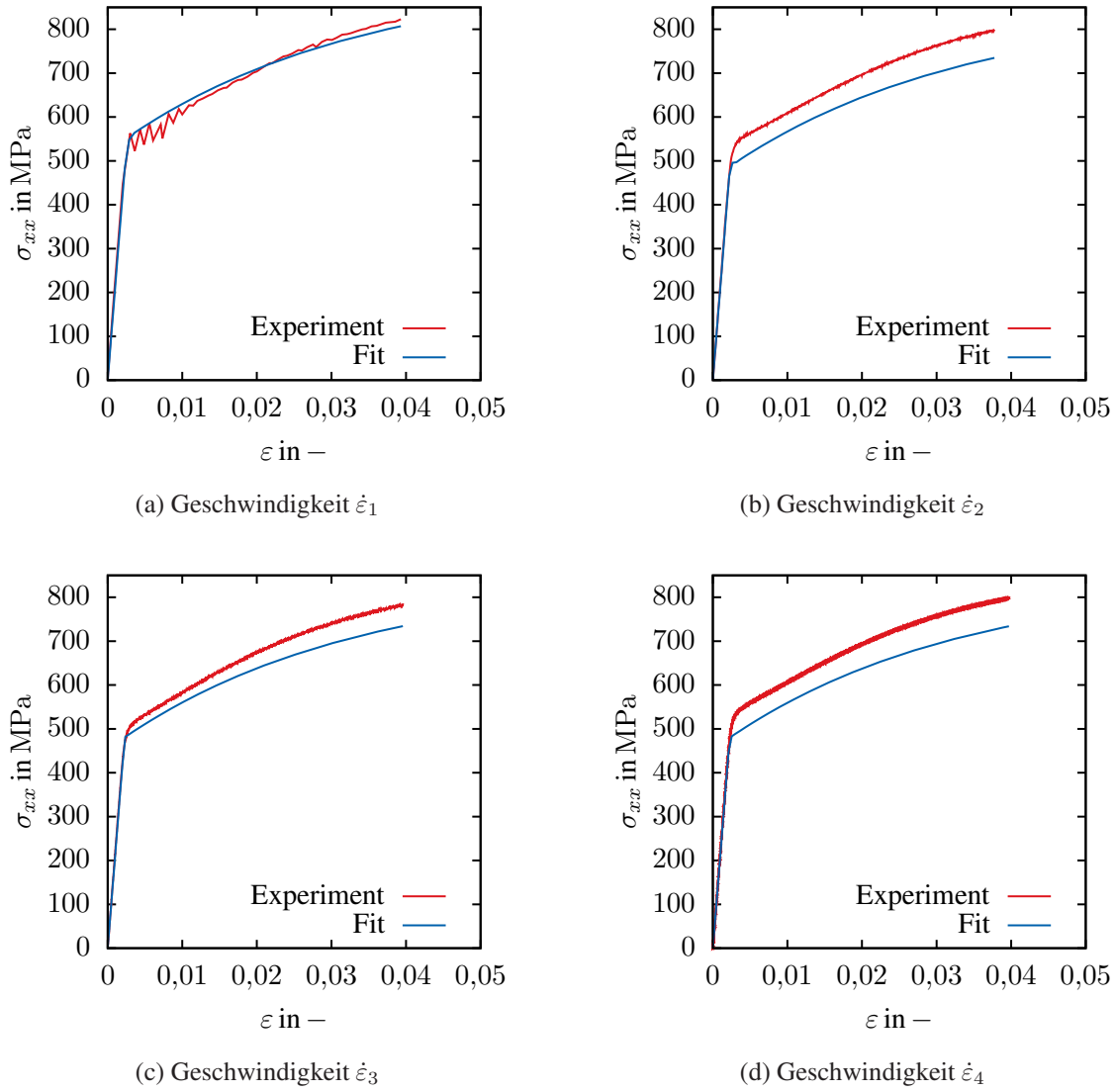


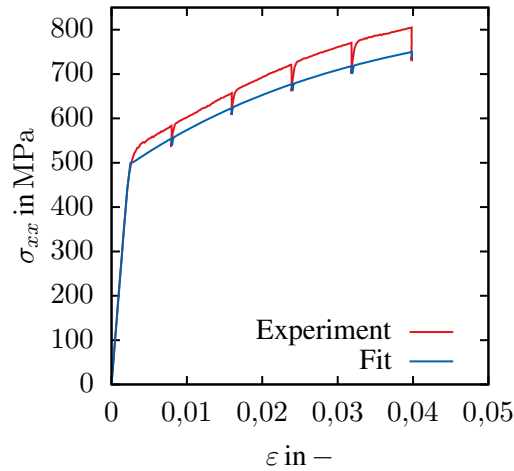
Abbildung 7.36: Parameteridentifikation - Teil 2

tern die Kovarianzmatrix

$$\check{\mathbf{C}}_{\kappa_2} = \begin{bmatrix} 3,349 & -317,208 & -1,894 \\ -317,208 & 34\,225,100 & 220,604 \\ -1,894 & 220,604 & 1,505 \end{bmatrix} \text{MPa}^2 \quad (7.124)$$

sowie die Korrelationsmatrix

$$\boldsymbol{\rho} = \begin{bmatrix} 1,000 & -0,937 & -0,844 \\ -0,937 & 1,000 & 0,972 \\ -0,844 & 0,972 & 1,000 \end{bmatrix}. \quad (7.125)$$



(a) Mehrstufiger Versuch

Abbildung 7.37: Parameteridentifikation - Teil 3

Die sich ergebenden Korrelationskoeffizienten $\rho_{kb} = -0,937$, $\rho_{kc} = -0,844$ und $\rho_{bc} = 0,972$ müssen mit Hilfe des t -Tests untersucht werden ($n_b = 5$). Dabei stellt sich heraus, dass die Korrelation zwischen den Parametern b und c und zwischen k und b statistisch signifikant ist, von einer sicheren Korrelation von k und c kann jedoch nicht gesprochen werden.

Somit sind alle Parameter des Modells bestimmt, mit Ausnahme der für die Viskosität maßgeblichen Parameter η und r . Zu ihrer Bestimmung werden alle Zugversuche, sowie der mehrstufige Zugversuch verwendet. Wählt man als Startwerte $\kappa_3^{(0)} = \{\eta, r\} = \{1 \times 10^8, 1,000\}$, so erhält man als Lösung von $\kappa_3^* = \{\eta^*, r^*\} = \{1,456 \times 10^8, 1,482\}$ mit einem Korrelationskoeffizienten zwischen beiden Werten von $\rho_{\eta r} = 0,999$. Es entspricht den Erwartungen, dass beide Parameter direkt voneinander abhängen und somit einer der Parameter festgehalten werden kann. Es wird daher $r = 1,000$ gesetzt und η mit identischem Startwert zu $\eta^* = (1,087 \pm 0,002) \times 10^6$ bestimmt.

Zusammenfassung der Optimierungsergebnisse

Betrachtet man die Ergebnisse Abbildung 7.35 bis Abbildung 7.37, so wird klar, weshalb die optimierten Ergebnisse gewisse Schwächen aufzeigen. In Abbildung 7.34 erkennt man, dass sich die Fließspannung k der experimentellen Daten ändert. Über die Gründe dafür kann nur spekuliert werden, jedoch sorgt diese Tatsache für die erkennbaren Probleme. Das Materialmodell kann diese Variation in der Fließspannung nicht wiedergeben. Es ist an dieser Stelle auch nicht von primärem Interesse, einen optimalen Fit für die experimentellen Daten zu finden (dafür wäre eine Ursachensuche für die Variati-

on der Fließspannung unablässig), wichtig sei an dieser Stelle die weitere Verwendung der gewonnenen Zusammenhänge und Untersuchungen an komplexeren Modellen.

Eine Zusammenfassung der Ergebnisse findet sich in Tabelle 7.6:

Tabelle 7.6: Identifizierte Werte

Größe	Einheit	identifizierter Wert	Vertrauensbereich	relativer Fehler
E	GPa	211,646	0,100	0,047 %
ν	—	0,250	—	—
k	MPa	479,972	1,830	0,381 %
b	—	8136,043	185,000	2,274 %
c	MPa	34,101	1,227	3,598 %
η	MPa s	$1,087 \times 10^6$	$0,002 \times 10^6$	0,184 %
r	—	1,000	—	—

Die gesamte Kovarianzmatrix hat die folgende Gestalt:

$$\check{\mathbf{C}}_{\kappa} = \begin{bmatrix} 0,01 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 \\ & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 & 0,00 \\ & & 3,35 & -317,21 & -1,89 & 0,00 & 0,00 \\ & & & 34\,255,10 & 220,60 & 0,00 & 0,00 \\ & & & & 1,51 & 0,00 & 0,00 \\ & & & & & 4,00 \times 10^6 & 0,00 \\ & & & & & & 0,00 \end{bmatrix} \quad (7.126)$$

7.5.4 Dickwandiges Rohr unter Innendruck

Als Beispiel für die Unsicherheitsanalyse soll an dieser Stelle das dickwandige Rohr unter Innendruck dienen. Dieses besitzt einen inneren Radius R_i und einen äußeren Radius R_a . Dickwandigkeit ist gegeben, solange das Verhältnis der Radien mindestens $R_a/R_i \geq 3$ gilt. Die Belastung am Innenrand erfolgt als ein linear ansteigender Druck, wodurch das Rohr von der Mitte her zu plastizieren beginnt. Es handelt sich um einen ebenen Verzerrungszustand, welcher realisiert wird, indem die zwei Grenzflächen in z -Richtung fixiert werden. Aufgrund der Rotationssymmetrie lässt sich das Problem auch rein eindimensional betrachten (vergleiche Abbildung 7.38b). Eine intensive Betrachtung des Rohrs unter Innendruck wurde in (Bonn, 1992) durchgeführt, vergleiche auch (Bonn und Haupt, 1995). Die Besonderheit des dickwandigen Rohrs unter Innendruck ist die Tatsache, dass sich die zugrundeliegenden Gleichungen in diesem Fall vereinfachen und mit beliebiger numerischer Genauigkeit lösen lassen. Neben Bonn (1992) haben auch Gao (1992), Gao (1994) und Zhao et al. (2003) dieses Problem untersucht.

Aufgrund der Problemstellung kann man verschiedene Situationen leicht erzeugen. Je nachdem, wie der Innendruck p gewählt wird, wird sich das Rohr entweder rein elas-

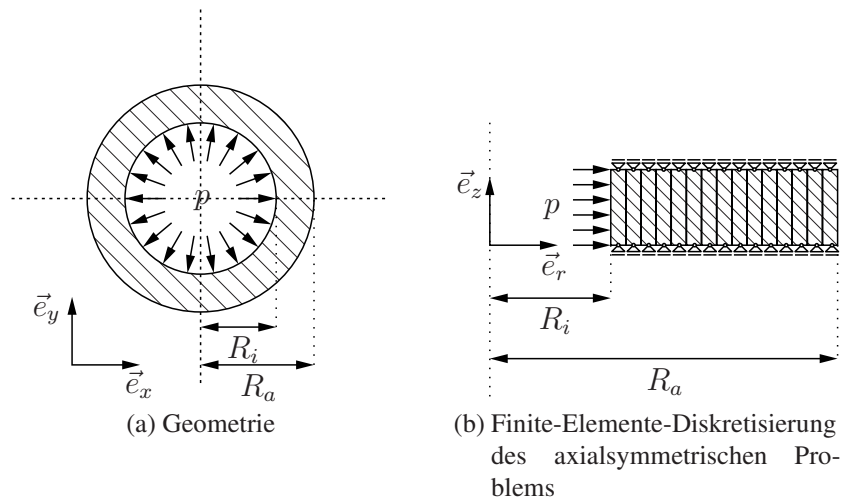
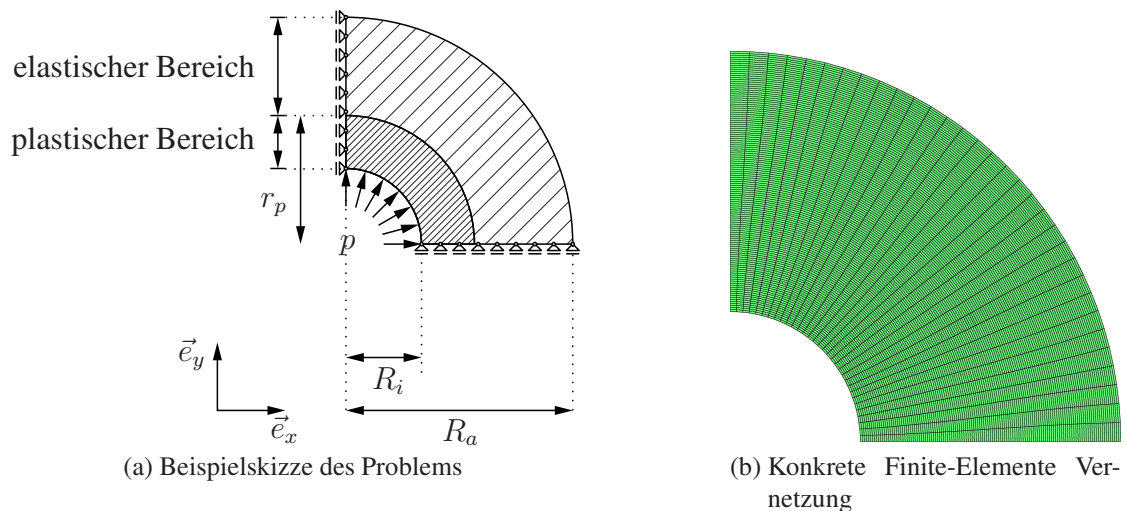


Abbildung 7.38: Rohr unter Innendruck

tisch, elastisch-plastisch oder rein plastisch verhalten. Daran kann man studieren, wie sich einzelne Materialparameter des verwendeten Modells im Zuge der Sensitivitätsanalyse auf die Simulation auswirken.

7.5.5 Konkrete Problemstellung

Das Materialmodell der Viskoplastizität wird mit Hilfe der identifizierten Materialparameter aus Abschnitt 7.5.3 untersucht. Obwohl die Problemstellung radialsymmetrisch ist, wird ein vollständiges dreidimensionales Materialmodell mit Symmetrierandbedingungen genutzt, um die Auswirkungen der Sensitivitäten zu untersuchen. Die untersuch-


Abbildung 7.39: Rohr unter Innendruck ($R_i = 4 \text{ cm}$, $R_a = 12 \text{ mm}$)

te Geometrie ist in Abbildung 7.39 dargestellt. Das Rohr wird sich anfangs rein elastisch deformieren bis am Innenrand ein Druck erreicht wird, der zu einer plastischen Verformung führt. Der so entstehende plastische Bereich wird sich (für größer werdenden Innendruck) immer weiter ausbreiten bis letztendlich das gesamte Rohr durchplastiziert ist.

Im hier vorliegenden Beispiel soll die Situation untersucht werden, in der sich das Rohr elastisch-plastisch verhält, d.h. dass es bis zu einem Radius von r_p durchplastiziert ist und sich von dort ausgehend bis zum Außenrand rein elastisch deformiert. Der Innendruck wird dabei linear in Form von $p(t) = 600 \text{ MPa s}^{-1}t$ innerhalb von $t = 1 \text{ s}$ aufgebracht. In radialer Richtung besitzt das Rohr 128 8-knotige Hexaederelemente. Das gesamte Modell besteht aus 4096 dieser Elemente mit insgesamt 8514 Knoten.

7.5.6 Sensitivitätsanalyse

Mit Hilfe der in Abschnitt 7.5.3 gewonnenen Kovarianzmatrix (7.126) kann nun das Verhalten der Finite-Elemente Simulation untersucht werden. Die verwendeten Materialparameter κ sind in Tabelle 7.6 dargestellt. Analog zum vorhergehenden Abschnitt 7.2.3 wird an dieser Stelle wieder zwischen Unsicherheiten unter Nutzung der teilweise besetzten Kovarianzmatrix (z.B. Δu) und den Unsicherheiten (z.B. $\underline{\Delta u}$), die sich nur mit den Diagonalelementen von $\check{\mathbf{C}}_\kappa$ berechnen. In Abbildung 7.40a sind die Radialverschiebungen und die zugehörigen Unsicherheiten dargestellt.

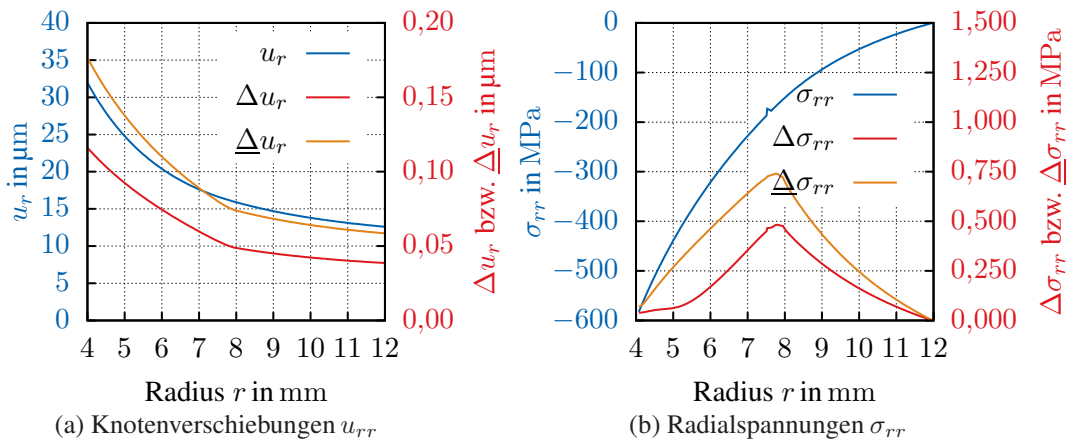


Abbildung 7.40: Radialsymmetrische Darstellung der Knotenverschiebungen und Spannungen sowie deren Unsicherheiten

Auch in diesem Fall sind die Unsicherheiten bei der Nutzung der gesamten Kovarianzmatrix $\check{\mathbf{C}}_{u_r}$ um etwa 33% kleiner als bei Vernachlässigung der Nebendiagonalterme $\check{\mathbf{C}}(u_r)$.

Da das Rohr durch einen Innendruck $p_i = 600 \text{ MPa}$ belastet wird, verhält es sich von Innenradius R_i ausgehend bis zu einem Radius r_p plastisch und für größer werdendes

r rein elastisch. Für das vorliegende Beispiel beträgt dieser Radius $r_p = 7,8 \text{ mm}$. In Abbildung 7.39 ist die Verteilung des plastischen und elastischen Bereichs dargestellt. Abbildung 7.40b stellt den Verlauf der Spannungen und deren Unsicherheit über dem Radius dar. Dort erkennt man r_p in der Art, dass die Radialspannungen an dieser Stelle einen Sprung aufweisen. Dies entspricht den Erwartungen, da die Funktion zur Berechnung der Spannungen eine Unstetigkeit beim Übergang vom elastischen in den plastischen Bereich besitzt. Der Verlauf der Unsicherheiten unterscheidet sich in diesem Fall deutlich vom Verlauf der Spannungen selbst. Diese haben ein ausgeprägtes Maximum am elastisch-plastischen Übergangspunkt. Auch sie besitzen eine sichtbare Unstetigkeit an der Stelle r_p . Vergleicht man die Unsicherheiten der Radialspannungen σ_{rr} entlang des Radius, so erkennt man auch hier, dass $\underline{\Delta\sigma_{rr}} \geq \Delta\sigma_{rr}$ gilt. Zudem wird deutlich, dass der Unterschied nicht nur in den Absolutwerten vorliegt, sondern dass der Verlauf auch qualitativ verschieden ist.

Einfluss einzelner Parameter

Nachdem der Einfluss der gesamten Kovarianzmatrix (und damit aller Unsicherheiten der Parameter gleichzeitig) dargestellt wurde, sollen im Folgenden die Einflüsse einzelner Materialparameter erfasst werden. Dazu wird die Kovarianzmatrix jeweils so modifiziert, dass nur ein Parameter ausschlaggebend ist. Dies wird für alle Parameter mit vorliegenden Unsicherheiten durchgeführt, eine grafische Darstellung dieser Ergebnisse findet sich in Abbildung 7.42.

Betrachtet man zunächst die Verschiebungen, so erkennt man eine deutliche Korrelation zwischen den Radialverschiebungen und ihrer Unsicherheiten. Die Fließspannung k besitzt die größten Werte, obwohl sie eine vergleichsweise geringe Unsicherheit von $\Delta k/k = 0,381 \%$ besitzt. Trotz ihrer um eine Größenordnung größeren relativen Unsicherheit, fällt der Einfluss der Parameter der isotropen Verfestigung c und b um etwa 50 % geringer aus als von k . Die Viskosität η trägt deutlich weniger zu den beobachteten Unsicherheiten bei, wobei der Einfluss des Elastizitätsmoduls praktisch vernachlässigbar ist.¹⁰

Auch bei der Betrachtung der Spannungen sticht sofort die Variation der Größenordnungen ins Auge. So ist die Unsicherheit, welche aus dem Elastizitätsmodul resultiert praktisch vernachlässigbar, sie ist 4 – 6 Größenordnungen kleiner als alle anderen betrachteten Unsicherheiten. Dies ist insofern überraschend, da die relative Unsicherheit des Elastizitätsmoduls mit 0,047 % nur zwei Größenordnungen unter den relativen Unsicherheiten der anderen Parameter liegt. Die höchsten Absolutwerte der Unsicherheiten gehen auf die Fließspannung k zurück, welche von ihrem Verlauf klar zwischen elastischem und plastischem Bereich unterscheiden. Dies erscheint plausibel, da die Fließspannung die ausschlaggebendste Größe für bei der Berechnung der Fließfunktion ist.

¹⁰Man beachte die Dimension in der Darstellung.

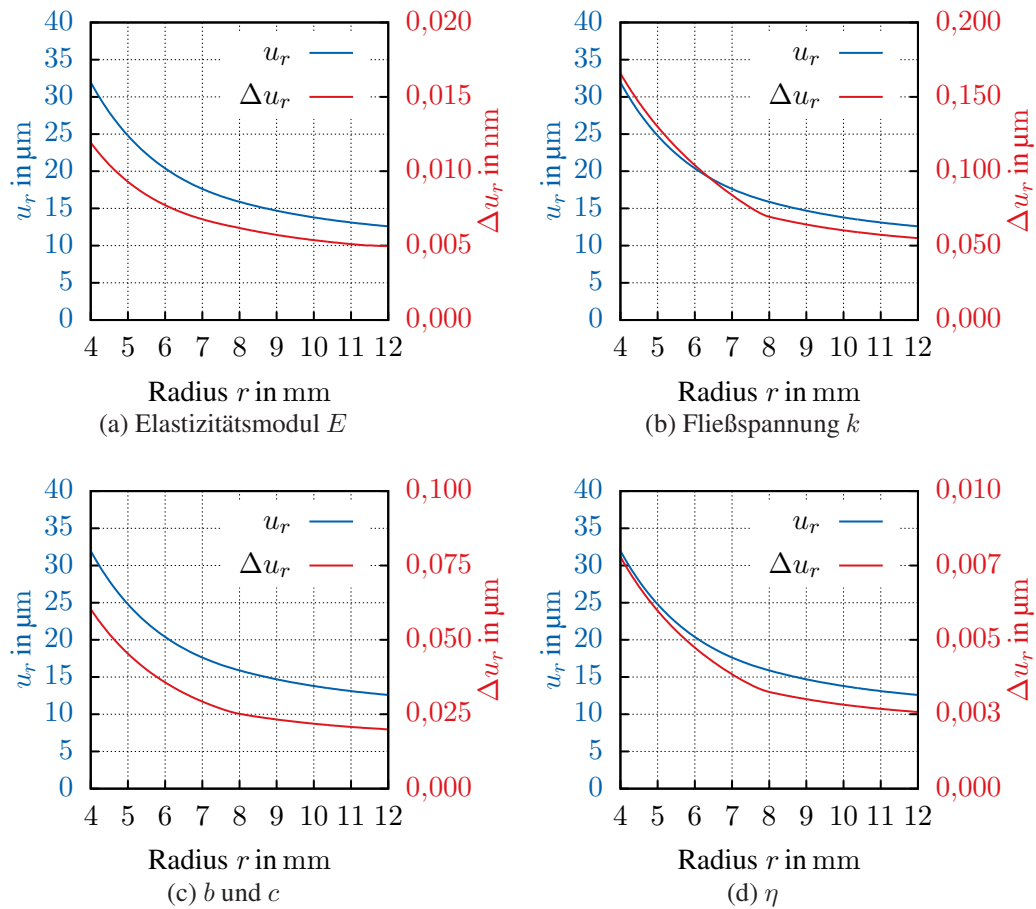


Abbildung 7.41: Einfluss einzelner Parameter auf die Verschiebungen

Da die Parameter der kinematischen Verfestigung den gleichen Effekt beschreiben, wurden sie zusammengefasst und ihr entsprechender Einfluss auf das Ergebnis untersucht, siehe Abbildung 7.42c. Es ist ersichtlich, dass ihr größter Einfluss im plastischen Bereich stattfindet, das Maximum liegt bei $r \approx 6,654$ mm im plastischen Bereich und noch deutlich vor dem Übergang zum elastischen Bereich. Für alle untersuchten Unsicherheiten ist ein starker Abfall zum Außenrand hin zu erkennen. Dort erreichen sie erwartungsgemäß der Wert Null.

Zusammenfassung

Vergleicht man die Ergebnisse mit dem Modellbeispiel der Hyperelastizität, so erkennt man klare Unterschiede. Die Materialparameter tragen in stark unterschiedlichem Maße zur Unsicherheit in sowohl Spannungen als auch Verschiebungen bei. Im Gegensatz zum untersuchten Beispiel der Hyperelastizität korrelieren in diesem Fall die Unsicherheiten der Verschiebungen mit den Verschiebungen. Bei den Spannungen ist keine klare Korre-

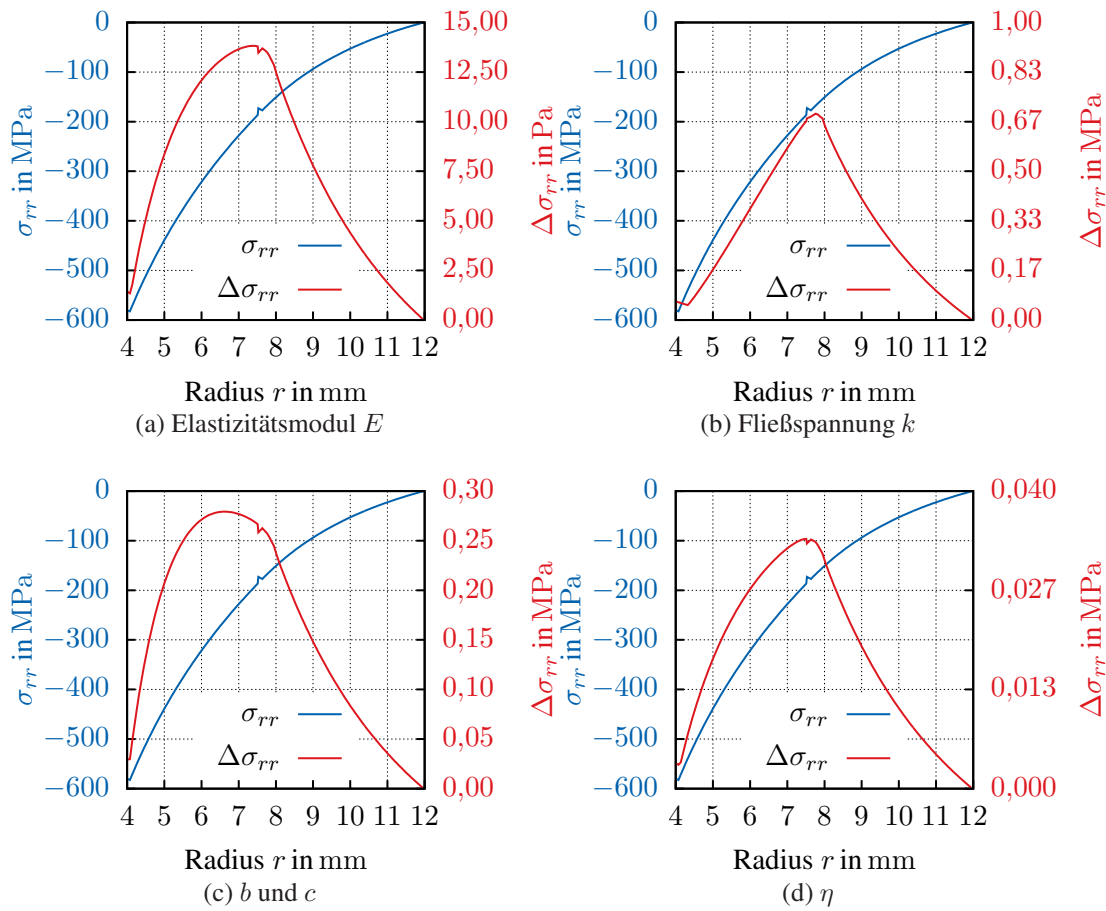


Abbildung 7.42: Einfluss einzelner Parameter

lation zu erkennen. Dies liegt in der deutlich komplexeren Modellierung der Viskoplas­ tizität begründet. Besonders der Einfluss der Fallunterscheidung durch die Fließfunktion ist deutlich zu erkennen. Während die Unsicherheiten der Verschiebungen am elastisch- plastischem Grenzbereich einen klaren Knick besitzen, haben die Unsicherheiten in den Spannungen einen kleinen Peak an dieser Stelle, verlaufen ansonsten aber ähnlich wie zuvor. Es ist deutlich erkennbar, dass die Unsicherheiten in den Spannungen zusammen mit deren Absolutwerten abnehmen.

Wie schon bei dem Beispiel der Hyperelastizität wirkt auch in diesem Fall die Nut- zung einer reinen Diagonalmatrix als Kovarianzmatrix dahingehend, dass die Unsicher- heiten eher überschätzt werden. Der Grund hierfür ist, dass die Nebendiagonalterme von $\check{\mathbf{C}}_{\kappa}$ zu einem größeren Teil aus negativen Werten bestehen als aus Positiven. Daher entspricht diese Wirkung den Erwartungen, ebenso wie die auch in der Hyperelastizität auftretende Eigenschaft, dass die Form der Funktion der Unsicherheiten nicht verändert, sondern nur der quantitative Wert vergrößert wird.

8 Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit hat die aus der Sensitivitätstheorie bekannten Methoden im Zuge von Finite-Elemente Simulationen untersucht. Dies geschah in Hinblick auf die in konstitutiven Materialmodellen enthaltenen Materialparameter. Dabei wurde die gesamte Lösungsstrategie durchlaufen, welche nötig ist, um erst die Materialparameter einschließlich ihrer Unsicherheiten zu berechnen als auch die Fortpflanzung der sich daraus ergebenden Fehler auf die Finite-Elemente Simulationen zu bestimmen.

Ausgehend von experimentell ermittelten Messwerten wurden die Materialparameter der Materialmodelle mit Hilfe von Optimierungsalgorithmen bestimmt, wobei insbesondere das Levenberg-Marquardt Verfahren zur Anwendung kam. Zur effizienten Nutzung der Optimierungsmethodik bei konstitutiven Modellen wurde dabei eine Möglichkeit aufgezeigt, dreidimensional formulierte und implementierte konstitutive Modelle auf homogene Spannungs- bzw. Verzerrungszustände zu reduzieren. Unter Zuhilfenahme der vorgestellten Möglichkeit der Reduktion ist es möglich, mit geringem Aufwand die schon vorhandenen Modellroutinen aus der FEM auszunutzen, um diese an einem einzelnen Punkt zu lösen. Dabei wurde ein Formalismus vorgestellt, welcher die Umwandlung auf andere homogene Spannungs- und Verzerrungszustände mit Hilfe von Filtermatrizen erlaubt. Die grundlegende Struktur der Gleichungen wird dabei insofern ausgenutzt, dass das in der FEM schon verwendete Mehrebenen-Newton Verfahren ausgenutzt wird, um die notwendigen Randbedingungen darin einzubetten und so das Problem numerisch zu behandeln.

Dabei wurde deutlich, dass sich die zugrundeliegende Gleichungsstruktur in der Art implementieren lässt, dass auf der Elementebene der Finite-Elemente Simulation die für die Sensitivitätsanalyse notwendigen Ableitungen direkt von der Materialroutine bereitgestellt werden. Analytisch bereitgestellte Ableitungen vermeiden dabei die bekannten Probleme, welche bei der Nutzung numerischer Differentiation entstehen. Da im Rahmen dieser Arbeit lediglich der genannte Formalismus hergeleitet wird, bietet es sich an, diesen in ein Finite-Elemente Programm zu implementieren und mit der Methode der numerischen Differentiation zu vergleichen. Es ist dabei zu erwarten, dass die analytische Implementierung einerseits stabilere Ergebnisse liefert und andererseits auch eine effizientere Durchführung gestattet.

Die Nutzung der Sensitivitätsanalyse im Rahmen der nichtlinearen Finite-Elemente Methode gestattet es neben der Bestimmung der Spannungsantworten in Bauteilen auch ein Maß zu erhalten, welches die Sicherheit der Berechnung charakterisiert. Eine Auffälligkeit ist die Tatsache, dass die resultierenden Unsicherheiten in ihrer relativen Form stark schwanken. In den gezeigten Beispielen ist deutlich zu erkennen, dass bei der Pa-

parameteridentifikation bei bekannter Streuung der Messdaten die Parameter selbst nur sehr kleine Unsicherheiten besitzen. Diese wiederum führen je nach konkretem Bauteil und Belastungszustand auf eine große Schwankung der Unsicherheiten. In bestimmten Bereichen sind die Unsicherheiten sehr klein, während sie in anderen Bereichen sehr große Werte annehmen. Ein Zusammenhang zwischen den Absolutwerten der zugehörigen Spannungen bzw. Verschiebungen ist nicht eindeutig zu erkennen und bedarf weiterer Untersuchung. Bei den untersuchten Beispielen fällt auf, dass im Fall der Hyperelastizität nur eine Korrelation zwischen den Spannungen und ihrer Unsicherheiten vorliegt, während im betrachteten Beispiel der Viskoplastizität die Korrelation nur zwischen den Verschiebungen zu beobachten ist. Bei der Aufbringung von Verschiebungen korrelieren die Unsicherheiten der Spannungen (Abstandshalter) und bei Aufbringung von Krafterandbedingungen korrelieren die Verschiebungen mit ihren Unsicherheiten (Rohr unter Innendruck). Ob dieser Zusammenhang zufällig ist oder ein grundlegendes Verhalten ist, benötigt weitere Untersuchungen.

Bei der Anwendung auf komplexe Geometrien und Probleme wird bei der Untersuchungen der Unsicherheiten von n Parametern rechentechnisch der n -fache zusätzliche Aufwand benötigt, welcher weit unter dem bei Monte-Carlo Methoden oder einer Minimum-Maximum-Abschätzung notwendigen Aufwand liegt.

Zusammenfassend wird deutlich, dass von bekannten Unsicherheiten in den Ausgangsparametern in keiner Weise auf das resultierende Ergebnis geschlossen werden kann und pauschale Aussagen somit schwer zu treffen sind. Zum besseren Verständnis des zugrundeliegenden Prozesses ist es hilfreich, genau einschätzen zu können, welche Faktoren in welcher Weise die genannten Schwankungen beeinflussen. Insgesamt zeigt sich, dass die Einbindung einer Rechnung über die Unsicherheiten keine große Herausforderung darstellt und somit zur Standardvorgehensweise bei der Berechnung von Bauteilen gehören sollte.

Anhang

1 Studentsche t-Verteilung

Tabelle 1: Studentsche t -Verteilung

	α -Quantil für zweiseitigem Vertrauensbereich							
	50,0 %	75,0 %	80,0 %	90,0 %	95,0 %	98,0 %	99,0 %	99,8 %
ν	α -Quantil für einseitigem Vertrauensbereich							
	75,0 %	87,5 %	90,0 %	95,0 %	97,5 %	99,0 %	99,5 %	99,9 %
1	1,000	2,414	3,078	6,314	12,706	31,821	63,657	318,309
2	0,816	1,604	1,886	2,920	4,303	6,965	9,925	22,327
3	0,765	1,423	1,638	2,353	3,182	4,541	5,841	10,215
4	0,741	1,344	1,533	2,132	2,776	3,747	4,604	7,173
5	0,727	1,301	1,476	2,015	2,571	3,365	4,032	5,893
6	0,718	1,273	1,440	1,943	2,447	3,143	3,707	5,208
7	0,711	1,254	1,415	1,895	2,365	2,998	3,499	4,785
8	0,706	1,240	1,397	1,860	2,306	2,896	3,355	4,501
9	0,703	1,230	1,383	1,833	2,262	2,821	3,250	4,297
10	0,700	1,221	1,372	1,812	2,228	2,764	3,169	4,144
11	0,697	1,214	1,363	1,796	2,201	2,718	3,106	4,025
12	0,695	1,209	1,356	1,782	2,179	2,681	3,055	3,930
13	0,694	1,204	1,350	1,771	2,160	2,650	3,012	3,852
14	0,692	1,200	1,345	1,761	2,145	2,624	2,977	3,787
15	0,691	1,197	1,341	1,753	2,131	2,602	2,947	3,733
16	0,690	1,194	1,337	1,746	2,120	2,583	2,921	3,686
17	0,689	1,191	1,333	1,740	2,110	2,567	2,898	3,646
18	0,688	1,189	1,330	1,734	2,101	2,552	2,878	3,610
19	0,688	1,187	1,328	1,729	2,093	2,539	2,861	3,579
20	0,687	1,185	1,325	1,725	2,086	2,528	2,845	3,552
25	0,684	1,178	1,316	1,708	2,060	2,485	2,787	3,450
50	0,679	1,164	1,299	1,676	2,009	2,403	2,678	3,261
∞	0,674	1,150	1,282	1,645	1,960	2,326	2,576	3,090

2 Anwendung des impliziten Euler Verfahrens zur Bestimmung des Ableitungen

Mit der Anwendung des impliziten Euler Verfahrens folgt aus Gleichung (??)

$$\mathbf{a}_{n+1} = \mathbf{a}_n + \Delta t_n \left[\frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \mathbf{y}} \mathbf{a}_{n+1} + \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \right] \quad (1)$$

$$\left[1 - \Delta t_n \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \mathbf{y}} \right] \mathbf{a}_{n+1} = \mathbf{a}_n + \Delta t_n \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}}{\partial \boldsymbol{\kappa}}. \quad (2)$$

Eine Rücksubstitution mit Hilfe von Gleichung (??) liefert

$$\left[1 - \Delta t_n \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}_{n+1}}{\partial \mathbf{y}_{n+1}} \right] \frac{\partial \mathbf{y}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} = \frac{\partial \mathbf{y}_n}{\partial \boldsymbol{\kappa}} + \Delta t_n \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}}. \quad (3)$$

Damit ist man in Besitz einer Iterationsvorschrift für die Berechnung der Ableitungen zum jeweils nächsten Zeitschritt t_{n+1} . Setzt man noch die Definition von \mathbf{y} ein, so erhält man

$$\begin{bmatrix} 1 - \Delta t_n \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}_{n+1}}{\partial \mathbf{u}_{n+1}} \\ 1 - \Delta t_n \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}_{n+1}}{\partial \mathbf{q}_{n+1}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{d\mathbf{u}_{n+1}}{d\boldsymbol{\kappa}} \\ \frac{d\mathbf{q}_{n+1}}{d\boldsymbol{\kappa}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{d\mathbf{u}_n}{d\boldsymbol{\kappa}} \\ \frac{d\mathbf{q}_n}{d\boldsymbol{\kappa}} \end{bmatrix} + \Delta t_n \frac{\partial \hat{\mathbf{F}}_{n+1}}{\partial \boldsymbol{\kappa}} \quad (4)$$

und ist somit im Besitz einer Iterationsvorschrift für die Berechnung der Ableitungen $d\mathbf{u}/d\boldsymbol{\kappa}$ und $d\mathbf{q}/d\boldsymbol{\kappa}$ zu jedem Zeitschritt eines Newton-Raphson Verfahrens.

3 Berechnung der Diagonalelemente des Matrixprodukts \mathbf{ABA}^T

Sind von der zu berechnenden Kovarianzmatrix $\check{\mathbf{C}}_{\mathcal{T}} \in \mathbb{R}^{n_{\text{dof}} \times n_{\text{dof}}}$ nur die Diagonalelemente von Interesse, so kann man rechnerisch und vor allem bezogen auf den Speicheraufwand erhebliche Einsparungen erzielen, wenn man nur diese Elemente direkt berechnet. Die Auswertung des gesamten Matrixprodukts ist dafür nicht notwendig.

Das Verfahren wird abstrahiert anhand des Matrixprodukts

$$\mathbf{C} = \mathbf{ABA}^T, \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n_a \times n_b}, \mathbf{B} \in \mathbb{R}^{n_b \times n_b}, \mathbf{C} \in \mathbb{R}^{n_a \times n_a} \quad (5)$$

dargestellt. Dabei gilt

$$\mathbf{A} = a_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^T, \quad (6)$$

$$\mathbf{A}^T = a_{mn} \mathbf{e}_n \mathbf{e}_m^T, \quad (7)$$

$$\mathbf{B} = b_{kl} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l^T \quad (8)$$

Für das Matrixprodukt gilt daher mit der Einsteinschen Summenkonvention

$$\mathbf{C} = \mathbf{ABA}^T = a_{ij} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^T b_{kl} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l^T a_{mn} \mathbf{e}_n \mathbf{e}_m^T = a_{ij} b_{kl} a_{mn} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j^T \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l^T \mathbf{e}_n \mathbf{e}_m^T \quad (9)$$

$$= a_{ij} b_{kl} a_{mn} \mathbf{e}_i \delta_{jk} \delta_{ln} \mathbf{e}_m^T = a_{ij} b_{jn} a_{mn} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_m^T. \quad (10)$$

Die Diagonalkomponenten von \mathbf{C} erhält man durch

$$c_{kk} = \mathbf{e}_k^T \mathbf{C} \mathbf{e}_k = a_{ij} b_{jn} a_{mn} \mathbf{e}_k^T \mathbf{e}_i \mathbf{e}_m^T \mathbf{e}_k = a_{ij} b_{jn} a_{mn} \delta_{ki} \delta_{mk} \quad (11)$$

$$= a_{kj} b_{jn} a_{kn} = \sum_{n=1}^{n_b} \sum_{j=1}^{n_b} a_{kj} b_{jn} a_{kn}, \quad \text{keine Summation über } k \quad (12)$$

4 Filtermatrizen

An dieser Stelle sollen kurz Kommentarlos weitere Möglichkeiten der Filtermatrizen genannt werden, welche in Abschnitt 6.3 eingeführt wurden.

Einaxialer Druck – verzerrungskontrolliert

$$\mathbf{Z}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Z}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (13)$$

Einaxialer Druck – spannungskontrolliert

$$\mathbf{Z}_1 = 0, \quad \mathbf{Z}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (14)$$

Torsion eines dünnwandigen Zylinders – kleine Deformationen

$$\mathbf{Z}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Z}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (15)$$

Ebener Verzerrungszustand

$$\mathbf{Z}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Z}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (16)$$

Ebener Spannungszustand

$$\mathbf{Z}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Z}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (17)$$

Einaxialer Druck, in Querrichtung festgehalten – verzerrungskontrolliert

$$\mathbf{Z}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Z}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (18)$$

Einaxialer Druck, in Querrichtung festgehalten – spannungskontrolliert

$$\mathbf{Z}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Z}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (19)$$

Equibiaxialer Zug – spannungskontrolliert

$$\mathbf{Z}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{Z}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (20)$$

Symbolverzeichnis

Die in dieser Arbeit verwendete Notation ist wie folgt definiert:

geometrische Vektoren	\vec{a}
Tensoren 2. Stufe	\mathbf{A}
Matrizen auf globaler Ebene	\mathbf{A}
Matrizen auf lokaler Ebene	\mathbf{A}
Spaltenvektoren auf globaler Ebene	\mathbf{a}
Spaltenvektoren auf lokaler Ebene	\mathbf{a}

Skalare

a_{ij}	Wichtungskoeffizienten in Runge-Kutta Verfahren
\check{c}_{ab}	Empirische Kovarianz zwischen den Vektoren a und b
da	Flächenelement der Momentankonfiguration
dA	Flächenelement der Referenzkonfiguration
dV	Volumenelement der Momentankonfiguration
dV_R	Volumenelement der Referenzkonfiguration
Δt_n	Zeitschrittweite zwischen dem Zeitpunkt t_n und t_{n+1}
$\partial\omega$	Rand eines Körpers in der Momentankonfiguration
$\partial\Omega$	Rand eines Körpers in der Referenzkonfiguration
$\partial_u\Omega$	Randbedingungen mit vorgegebenen Verschiebungen
$\partial_s\Omega$	Randbedingungen mit vorgegebenen Spannungen
Δa	Unsicherheit der Größe a
e	Spezifische innere Energie des materiellen Körpers
E	Innere Energie des materiellen Körpers
$E(A)$	Erwartungswert des Ereignisses A
\hat{F}_n	Empirische Verteilungsfunktion
γ^e	Rand eines diskreten Volumenelements
Γ^e	Rand des diskreten Volumenelements bezogen auf die Referenzkonfiguration
Γ^e	Diskretisierte Oberfläche eines Körpers in der Referenzkonfiguration
γ^e	Diskretisierte Oberfläche eines Körpers in der Momentankonfiguration
$\hat{\Gamma}$	Entropieproduktion
h	Absolute Häufigkeit
$f(\kappa)$	Empirische Wahrscheinlichkeitsdichte
J	Determinante des Deformationsgradienten
J^e	Determinante der Jacobi-Matrix \mathbf{J}^e
j^e	Determinante der Jacobi-Matrix \mathbf{j}^e
K	Kinetische Energie des materiellen Körpers
κ	Einzelner Beobachtungswert
k	Konditionszahl
L	Leistung der auf den materiellen Körper wirkenden Kräfte
λ	Dämpfungsfaktor im Levenberg-Marquardt Verfahren
λ_{\min}	Kleinsten Eigenwert von $\mathbf{J}^T \mathbf{J}$
λ_{\max}	Größten Eigenwert von $\mathbf{J}^T \mathbf{J}$
m	Masse
m	Anzahl der Gleichungen bezüglich der Optimierung von Materialparametern
N_a	Ansatzfunktion bezogen auf den Knoten a
n_e	Anzahl an finiten Elementen im Finite-Elemente Netz

n_{eq}	Anzahl an Gleichungen bzw. Unbekannten
n_Q	Anzahl aller internen Variablen
n_u	Anzahl aller unbekannten Knotenverschiebungen
n_{ua}	Anzahl aller Knotenverschiebungen
n_{GP}	Anzahl aller Gausspunkte
ν	Freiheitsgrad der t -Verteilung
n_κ	Anzahl an Materialparametern eines konstitutiven Modells
n_b	Anzahl an Messungen eines Wertes κ im Vektor $\hat{\kappa}$
ω	Volumen eines Körpers in der Momentankonfiguration
ω^e	Diskretes Volumenelement bezogen auf die Momentankonfiguration
Ω	Volumen eines Körpers in der Referenzkonfiguration
Ω^e	Diskretes Volumenelement bezogen auf die Momentankonfiguration
Ω_\square	Abstraktes normiertes Referenzelement
Ω^e	Volumen eines Elements in der Referenzkonfiguration
ω^e	Volumen eines Elements in der Momentankonfiguration
π^h	
$P(A)$	Wahrscheinlichkeit für das Eintreten von Ereignis A
Q	Wärmeenergie des materiellen Körpers
ρ	Dichte in der Momentankonfiguration
ρ_R	Dichte in der Referenzkonfiguration
ρ_{ab}	Empirischer Korrelationskoeffizient zwischen den Größen a und b
r	Relative Häufigkeit
S	Entropie des materiellen Körpers
s	Entropiedichte des materiellen Körpers
Σ	Oberflächenverteilte Entropiezufuhr auf den materiellen Körper
$s_{\mathbf{a}}$	Empirische Standardabweichung der Werte des Vektors \mathbf{a}
$s_{\mathbf{a}}^2$	Empirische Varianz der Werte des Vektors \mathbf{a}
t	Zeit
θ	Absolute Temperatur
x_i	Komponenten des Ortsvektors
Materialparameter	
E	Elastizitätsmodul
ν	Poissonzahl
K	Kompressionsmodul
G	Schubmodul
η	Viskosität
α	Materialparameter der Hyperelastizität
c_{10}	Materialparameter der Hyperelastizität
c_{01}	Materialparameter der Hyperelastizität

Vektoren

\vec{c}	Beliebiger raumfester Bezugspunkt des Drehimpulsvektors
$d\vec{a}$	Flächenelement der Momentankonfiguration
$d\vec{A}_R$	Flächenelement der Referenzkonfiguration
$d\vec{x}$	Linielement der Momentankonfiguration
$d\vec{X}$	Linielement der Referenzkonfiguration
$\vec{D}_{\vec{c}}$	Drehimpulsvektor eines materiellen Punktes in Bezug auf den Punkt \vec{c}
$\delta\vec{u}$	Vektor von virtuellen Verschiebungen
\vec{e}_i	Allgemeine Basisvektoren
\vec{k}	Kraftdichtevektor eines materiellen Punktes (Beschleunigung)
\vec{n}	Normale des Flächenelements in der Momentankonfiguration
\vec{n}_R	Normale des Flächenelements in der Referenzkonfiguration
\vec{p}	Impulsvektor eines materiellen Punktes
$\vec{\mathcal{R}}$	Referenzkonfiguration des materiellen Körpers
\vec{t}	Cauchy Spannungsvektor
\vec{t}_R	Piola Spannungsvektor
\vec{u}	Verschiebungsvektor
\vec{v}	Geschwindigkeitsvektor eines materiellen Punktes
$\vec{\chi}$	Beliebige Konfiguration eines materiellen Körpers
$\vec{\chi}_t$	Momentankonfiguration des materiellen Körpers
$\vec{\chi}_R$	Bewegung des materiellen Körpers
\vec{x}	Ortsvektor der Momentankonfiguration
\vec{X}	Ortsvektor der Referenzkonfiguration

Tensoren 2. Stufe

A	Almansischer Verzerrungstensor
B	Linker Cauchy-Green Tensor
\bar{B}	Unimodularer linker Cauchy-Green Tensor
C	Rechter Cauchy-Green Tensor
\bar{C}	Unimodularer rechter Cauchy-Green Tensor
D	Verzerrungsgeschwindigkeitstensor
δE	Virtueller Greenscher Verzerrungstensor
E	Greenscher Verzerrungstensor
ϵ	Greenscher Verzerrungstensor für die Näherung von kleinen Verzerrungen
F	Deformationsgradient
\hat{F}	Volumenerhaltender Anteil des Deformationsgradienten
\tilde{F}	Volumenverändernder Anteil des Deformationsgradienten
H	Materieller Verschiebungsgradient
I	Einheitstensor
L	Räumlicher Geschwindigkeitsgradient
R	Rotationssymmetrischer Anteil des Deformationsgradienten
S	Kirchhoff'scher Spannungstensor
T	Cauchy-Green Spannungstensor
T_R	Erster Piola-Kirchhoff Spannungstensor
\tilde{T}	Zweiter Piola-Kirchhoff Spannungstensor
U	Rechter Strecktensor
V	Linker Strecktensor
W	Wirbeltensor

Matrizen und Spaltenmatrizen

\mathbf{B}	Verzerrungs-Verschiebungsmatrix bezogen auf die Momentankonfiguration
$\tilde{\mathbf{B}}$	Verzerrungs-Verschiebungsmatrix bezogen auf die Referenzkonfiguration
\mathbf{B}^e	Verzerrungs-Verschiebungsmatrix auf Elementebene bezogen auf die Momentankonfiguration
$\tilde{\mathbf{B}}^e$	Verzerrungs-Verschiebungsmatrix auf Elementebene bezogen auf die Referenzkonfiguration
$\tilde{\mathbf{B}}_a$	Verzerrungs-Verschiebungsmatrix der gesamten Struktur
$\tilde{\mathbf{B}}$	Verzerrungs-Verschiebungsmatrix der vorgegebenen Knotenverschiebungen
\mathbf{C}^e	Rechter Cauchy-Green Tensor in Matrixnotation im Element
$\check{\mathbf{C}}_{\mathbf{K}}$	Empirische Kovarianzmatrix zwischen den Beobachtungswerten \mathbf{K}
\mathbf{d}	Vektor der experimentellen Daten
\mathbf{E}	Verzerrungsvektor
\mathbf{E}^h	Diskretisierter Verzerrungsvektor der gesamten Struktur
\mathbf{F}_{23}^e	Push-Forward Operator im Element in Matrixform
\mathbf{J}^e	Jacobi-Matrix der Transformation vom Parameterraum ξ in die Referenzkonfiguration
\mathbf{J}	Jacobi-Matrix der Optimierung
\mathbf{J}_k	Jacobi-Matrix der Optimierung im k -ten Iterationsschritt
$\hat{\kappa}^{(i)}$	i -ter Beobachtungsvektor mit n_b Beobachtungswerten
κ	Vektor von Materialparametern
κ^*	Optimaler Vektor von Materialparametern
κ_0	Startvektor (im Sinne der Optimierung) von Materialparametern
\mathbf{K}	$\in \mathbb{R}^{n_b \times n_\kappa}$ -Matrix mit Beobachtungswerten
\mathbf{L}_{ni}	Im Sinne des Runge-Kutta Verfahrens diskretisiertes nichtlineares Gleichungssystem des differentiellen Anteils des DAE-Systems
\mathbf{N}_a	Matrix aller Ansatzfunktionen der gesamten Struktur
\mathbf{N}	Matrix aller Ansatzfunktionen der unbekannten Knotenverschiebungen
\mathbf{N}^e	Matrix der Ansatzfunktionen im Referenzelement
$\bar{\mathbf{N}}$	Matrix aller Ansatzfunktionen der vorgegebenen Verschiebungsfreiheitsgrade
\mathbf{p}	Suchrichtung eines Optimierungsalgorithmus

\mathbf{q}	Vektor der inneren Variablen am materiellen Punkt
\mathbf{q}	Vektor aller inneren Variablen an allen Gauss-Punkten
\mathbf{q}^e	Vektor der inneren Variablen im Element
\mathbf{Q}_{ni}	Stufenwert der inneren Variablen während der Zeitdiskretisierung im Zuge des Runge-Kutta Verfahrens
r	Funktion der Evolutionsgleichungen
\mathbf{R}_{ni}	Im Sinne des Runge-Kutta Verfahrens diskretisiertes nichtlineares Gleichungssystem
$\bar{\mathbf{R}}(\mathbf{K})$	Empirische Korrelationsmatrix der Beobachtungsmatrix \mathbf{K}
\mathbf{R}	Residuumsvektor der Optimierung
\mathbf{S}^e	Gewichtete Cauchy-Spannungen im Element
\mathbf{S}_{ni}	Startwert in diagonalimpliziten Runge-Kutta Verfahren
\mathbf{s}	Vektor der Simulationsdaten
$\tilde{\mathbf{T}}$	2. Piola-Kirchoff Spannungsvektor
\mathbf{T}_R	1. Piola-Kirchoff Spannungsvektor
\mathbf{u}	Vektor der unbekannten Knotenverschiebungen
$\bar{\mathbf{u}}$	Vektor der bekannten Knotenverschiebungen
\mathbf{u}^h	Verschiebungsansatz des gesamten Gebiets
\mathbf{u}_a	Vektor aller Knotenverschiebungen
\mathbf{u}^e	Elementknotenverschiebungen
\mathbf{U}_{ni}	Stufenwert der Verschiebungen während der Zeitdiskretisierung im Zuge des Runge-Kutta Verfahrens
$\mathbf{V}(\mathbf{K})$	Diagonalmatrix der Diagonalelemente der Matrix \mathbf{K}
ξ	Koordinaten im Referenzelement Ω_\square
ξ_l	Koordinate des l -ten Gausspunkts im Referenzelement
\mathbf{x}	Ortsvektor der Momentankonfiguration in Matrixnotation
\mathbf{X}	Ortsvektor der Momentankonfiguration in Matrixnotation
χ^e	Koordinatentransformation der lokalen Koordinaten des Einheitselements auf die globalen Koordinaten der Momentankonfiguration
χ_R^e	Koordinatentransformation der lokalen Koordinaten des Einheitselements auf globalen Koordinaten der Referenzkonfiguration
\mathbf{X}	Koordinaten der Referenzkonfiguration
\mathbf{x}	Koordinaten der Momentankonfiguration
\mathbf{y}	Allgemeine Größe
\mathbf{y}_{n+1}	Integrationswert einer allgemeinen Größe zum Zeitpunkt t_{n+1}
\mathbf{Y}_{ni}	Stufenwerte der Runge-Kutta Verfahren
\mathbf{Z}^e	Matrix aller Ansatzfunktionen von unbekannten Knotenverschiebungen
$\bar{\mathbf{Z}}^e$	Matrix aller Ansatzfunktionen von vorgegebenen Knotenverschiebungen
$\bar{\mathbf{Z}}_a^e$	gesamte Zuordnungsmatrix
$\bar{\mathbf{Z}}_l^e$	Zuordnungsmatrix der inneren Variablen am Gausspunkt

Verschiedenes

$(\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3)$	Basis von Einheitsvektoren $\vec{e}_1, \vec{e}_2, \vec{e}_3$
\mathcal{B}	Materieller Körper
\mathcal{B}^h	Diskretes Gebiet des materiellen Körpers
$\partial\mathcal{B}^h$	Rand des diskreten Gebiets \mathcal{B}^h
\mathcal{P}	Materieller Punkt
$\mathcal{N}(s_{\mathbf{a}}^2, \bar{\mathbf{a}})$	Normalverteilung mit der Varianz s^2 und dem Mittelwert von \mathbf{a}

Mathematische Operatoren

$\dot{\mathbf{A}}$	Materielle Zeitableitung
$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$	Skalarprodukt
$\vec{a} \times \vec{b}$	Kreuzprodukt
$\vec{a} \otimes \vec{b}$	Dyadisches Produkt
\mathbf{A}^D	Deviator eines Tensors, $\mathbf{A}^D = \mathbf{A} - 1/3(\text{Sp } \mathbf{A})\mathbf{1}$
$\mathbf{A}^T, \mathbf{a}^T, \mathbf{A}^T$	Transponierter Tensor, Vektor bzw. transponierte Matrix
$\bar{\mathbf{a}}$	Mittelwert der Komponenten des Vektors \mathbf{a}
\det	Determinante eines Tensors oder eine Matrix
diag	Diagonalmatrix
div	Divergenz bezüglich räumlicher Koordinaten
Div	Divergenz bezüglich materieller Koordinaten
d/dt	Allgemeine Zeitableitung
grad	Gradient bezüglich räumlicher Koordinaten
Grad	Gradient bezüglich materieller Koordinaten
\max	Maximum eines Vektors
\min	Minimum eines Vektors
∇	Nabla-Operator
Sp	Spur eines Tensors oder eine Matrix

Literaturverzeichnis

- Adelman, H. M. und Haftka, R. T. Sensitivity Analysis of Discrete Structural Systems. *AIAA Journal*, 24(5):823–832, 1986.
- Altenbach, J. und Altenbach, H. *Einführung in die Kontinuumsmechanik*. Teubner Verlag, 1. Auflage, 1994.
- Anscombe, F. J. Graphs in statistical analysis. *The American Statistician*, 27(1):17–21, 1973.
- Ascher, U. M. und Petzold, L. R. *Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, 1. Auflage, 1998.
- Barlow, R. J. *Statistics: A Guide to the Use of Statistical Methods in the Physical Sciences*. Wiley, Chichester, 1. Auflage, 1993.
- Bathe, K. J. *Finite-Elemente-Methoden*. Springer-Verlag, Berlin, 2. Auflage, 2002.
- Belytschko, T., Liu, W. K., und Moran, B. *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*. John Wiley and Sons, Chichester, 2000.
- Bevington, P. R. und Robinson, D. K. *Data Reduction and Error Analysis for the Physical Sciences*. McGraw-Hill, New York, 3. Auflage, 2003.
- Bier, W. und Hartmann, S. A finite strain constitutive model for metal powder compaction using a unique and convex single surface yield function. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 25(6):1009–1030, 2006.
- Bonn, R. *Rotationssymmetrische inhomogene Deformationen in der finiten Plastizitätstheorie unter der Einbeziehung von Verfestigungsmodellen*. Dissertation, Universität Kassel, 1992.
- Bonn, R. und Haupt, P. Exact solutions for large elastoplastic deformations of a thick-walled tube under internal pressure. *International Journal of Plasticity*, 11(1):99–118, 1995.
- Bosch, K. *Elementare Einführung in die Wahrscheinlichkeitsrechnung*. Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, 1999.

- Bosch, K. *Elementare Einführung in die angewandte Statistik*. Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, 2000.
- Brayton, R. K. und Spence, R. *Sensitivity and Optimization*. Elsevier Science Ltd, 1980.
- Brenan, K. E., Campbell, S. L., und Petzhold, L. R. *Numerical Solution of Initial-Value Problems in Differential-Algebraic Equations*. Classics in Applied Mathematics 14. SIAM Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1996.
- Butcher, J. C. *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*. John Wiley & Sons, Ltd., 2. Auflage, 2008.
- Büttner, J. und Simeon, B. Time integration of the dual problem of elastoplasticity by Runge-Kutta methods. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 41:1564–1584, 2003.
- Cacuci, D. G. *Sensitivity and Uncertainty Analysis: Vol. I*. Chapman & Hall, 2003.
- Cardoso, B. Structural Optimization Design sensitivity analysis of nonlinear dynamic response of structural and mechanical systems. *Structural Optimization*, 46:37–46, 1992.
- Chaboche, J.-L. Viscoplastic constitutive equations for the description of cyclic and anisotropic behavior of metals. *Bulletin de L'Academie Polonaise des Science, Série de Science Techniques*, 25(1):33–42, 1977.
- Chen, Z. und Diebels, S. Nanoindentation of soft polymers: Modeling, experiments and parameter identification. *Technische Mechanik*, 34(3-4):166–189, 2014.
- Coleman, B. D. und Gurtin, M. E. Thermodynamics with Internal State Variables. *The Journal of Chemical Physics*, 47:597–613, 1967.
- Coleman, B. D. und Noll, W. Foundations of linear viscoelasticity. *Reviews of Modern Physics*, 33(2):239, 1961.
- Coleman, T. und Li, Y. On the convergence of interior-reflective Newton methods for nonlinear minimization subject to bounds. *Mathematical programming*, 67:189–224, 1994.
- Coleman, T. und Li, Y. An interior trust region approach for nonlinear minimization subject to bounds. *SIAM Journal on Optimization*, 1996.
- Crochet, M. und Naghdi, P. A class of simple solids with fading memory. *International Journal of Engineering Science*, 7(12):1173–1198, 1969.
- Cybenko, G. Neural networks in computational mechanics. *Archives of Computational Methods in Engineering*, 3(4):435–512, 1996.

- Dehling, H. und Haupt, B. *Einführung in die Wahrscheinlichkeitstheorie und Statistik*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2. auflage Auflage, 2004.
- Dhatt, G. und Touzot, G. *The finite element method displayed*. Wiley and Sons, Chichester, 1985.
- Draper, N. R. und Smith, H. *Applied regression analysis*. John Wiley & Sons, New-York, 3. Auflage, 1998.
- Drozдов, A. D. *Finite Elasticity and Viscoelasticity*. World Scientific Publ., Singapore, 1996.
- Düster, A., Niggel, A., Nübel, V., und Rank, E. A Numerical Investigation of High-Order Finite Elements for Problems of Elastoplasticity. *Journal of Scientific Computing*, 17(1):397–404, 2002.
- Eckart, C. The Thermodynamics of Irreversible Processes IV. The Theory of Elasticity and Anelasticity. 1948.
- Eckert, S., Baaser, H., Gross, D., und Scherf, O. A BDF2 integration method with stepsize control for elastoplasticity. *Computational Mechanics*, 34(5):377–386, 2004.
- Ellsiepen, P. und Hartmann, S. Remarks on the interpretation of current non-linear finite element analyses as differential–algebraic equations. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 51(6):679–707, 2001.
- Eyi, S. Finite-Difference Sensitivity Calculation in Iteratively Solved Problems. In *20th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference*, Juni, Seiten 1–33. Honolulu, 2011.
- Flory, P. J. Thermodynamic relations for high elastic materials. *Transaction of the Faraday Society*, 57:829–838, 1961.
- Freedman, D. und Diaconis, P. On the histogram as a density estimator: L2 theory. *Zeitschrift für Wahrscheinlichkeitstheorie und Verwandte Gebiete*, 57(4):453–476, 1981.
- Fritzen, P. *Numerische Behandlung nichtlinearer Probleme der Elastizitäts- und Plastizitätstheorie*. Dissertation, Institut für Mathematik, Universität Darmstadt, 1997.
- Gao, X.-l. An exact elasto-plastic solution for an open-ended thick-walled cylinder of a strain-hardening material. *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, 52:129–144, 1992.
- Gao, X.-L. An exact elasto-plastic solution for a thick-walled spherical shell of elastic linear-hardening material with finite deformations. *International Journal of Pressure Vessels and Piping*, 57:45–56, 1994.

- Gill, P. E., Murray, W., Saunders, M. A., und Wright, M. H. Computing Finite-Difference Approximations To Derivatives For Numerical Optimisation, Technical report, Stanford University, California, 1980.
- Gill, P. E., Murray, W., Saunders, M. a., und Wright, M. H. Computing Forward-Difference Intervals for Numerical Optimization. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 4(2):310–321, 1983.
- Gill, P. E., Murray, W., und Wright, M. H. *Practical optimization*. Academic Press, 1981.
- Goldberg, D. E. *Genetic Algorithms in Search, Optimization and Machine Learning*. Addison-Wesley Longman Publishing Co., Inc., Boston, MA, USA, 1. Auflage, 1989.
- Green, M. S. und Tobolsky, A. V. A new approach to the theory of relaxing polymeric media. *The Journal of Chemical Physics*, 14:80–92, 1946.
- Griewank, A. und Walther, A. *Evaluating Derivatives: Principles and Techniques of Algorithmic Differentiation*. SIAM Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2008.
- Haftka, R. T. Sensitivity calculations for iteratively solved problems. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 21(April 1984), 1985.
- Haftka, R. T. und Adelman, H. M. Recent developments in structural sensitivity analysis. *Structural Optimization*, 1(3):137–151, 1989.
- Haftka, R. T. und Malkus, D. S. Calculation of sensitivity derivatives in thermal problems by finite differences. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 17(12):1811–1812, 1981.
- Hairer, E., Norsett, S. P., und Wanner, G. *Solving ordinary differential equations I*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin, 2. Auflage, 1993.
- Hairer, E. und Wanner, G. *Solving ordinary differential equations II*. Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, 2. Auflage, 1996.
- Hamkar, A.-W. *Eine iterationsfreie Finite-Elemente Methode im Rahmen der finiten Thermoviskoelastizität*. Dissertation, Technische Universität Clausthal, 2013.
- Hartmann, S. *Lösung von Randwertaufgaben der Elastoplastizität: ein Finite-Elemente-Konzept für nichtlineare kinematische Verfestigung bei kleinen und finiten Verzerrungen*. Dissertation, Gesamthochschule Kassel, 1993.
- Hartmann, S. Zur Berechnung inelastischer Festkörper mit der Methode der finiten Elemente. In Hartmann, S., Haupt, P., und Ulbricht, V., Editor, *Modellierung und Identifikation*, Seiten 119–130. Gesamthochschul-Bibliothek, Kassel, 1998.

- Hartmann, S. Computation in finite-strain viscoelasticity: finite elements based on the interpretation as differential–algebraic equations. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 191(13-14):1439–1470, 2002.
- Hartmann, S. *Finite-Element Berechnung inelastischer Kontinua*. Habilitation, Institut für Mechanik, Universität Kassel, 2003.
- Hartmann, S. A remark on the application of the Newton-Raphson method in non-linear finite element analysis. *Computational Mechanics*, 36(2):100–116, 2005.
- Hartmann, S. TASA-FEM: Ein Finite-Elemente Programm für raum-zeitadaptive gekoppelte Strukturberechnungen, Version 1.0. Mitteilung des Instituts für Mechanik 1/06, Institut für Mechanik, Universität Kassel, 2006.
- Hartmann, S. *Introduction to Theory of Materials*. Clausthal-Zellerfeld, Germany, 2012.
- Hartmann, S., Gibmeier, J., und Scholtes, B. Experiments and material parameter identification using finite elements. Uniaxial tests and validation using instrumented indentation tests. *Experimental Mechanics*, 46(1):5–18, 2006.
- Hartmann, S. und Hamkar, A.-W. Rosenbrock-type methods applied to finite element computations within finite strain viscoelasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 199:1455–1470, 2010.
- Hartmann, S. und Haupt, P. Stress computation and consistent tangent operator using non-linear kinematic hardening models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 36:3801–3814, 1993.
- Hartmann, S., Lühns, G., und Haupt, P. An efficient stress algorithm with applications in viscoplasticity and plasticity. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 1013(November 1995):991–1013, 1997.
- Hartmann, S. und Neff, P. Polyconvexity of generalized polynomial-type hyperelastic strain energy functions for near-incompressibility. *International Journal of Solids and Structures*, 40(11):2767–2791, 2003.
- Hartmann, S., Quint, K. J., und Hamkar, A.-W. Displacement Control in Time-Adaptive Non-Linear Finite-Element Analysis. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 88(5):342–364, 2008.
- Haug, E. J. Efficient optimal design of structures by generalized steepest descent programming. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 10:747–766, 1976.
- Haug, E. J. und Rousselet, B. Design Sensitivity Analysis in Structural Mechanics. I. Static Response Variations. *Journal of Structural Mechanics*, 8(1):17–41, 1980.

- Haupt, P. *Continuum mechanics and theory of materials*. Springer Berlin Heidelberg, 2002.
- Haupt, P. und Lion, A. On finite linear viscoelasticity of incompressible isotropic materials. *Acta Mechanica*, 159(1):87–124, 2002.
- Hofer, E. Sensitivity analysis in the context of uncertainty analysis for computationally intensive models. *Computer Physics Communications*, 117(1):21–34, 1999.
- Holzapfel, G. A. *Nonlinear Solid Mechanics*. Wiley & Sons, Chichester, 2000.
- Hoyer, W. und Schmidt, J. W. Newton-Type Decomposition Methods for Equations Arising in Network Analysis. *ZAMM Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik*, 64:397–405, 1984.
- Huber, N. und Tsakmakis, C. A neural network tool for identifying the material parameters of a finite deformation viscoplasticity model with static recovery. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, 191:353–384, 2001.
- Hübner, G. *Stochastik*. Vieweg + Teubner, Wiesbaden, 5. Auflage, 2009.
- Hughes, T. J. R. *The finite element method: linear static and dynamic finite element analysis*. Dover Publications, New York, 2000.
- James, A. G., Green, A., und Simpson, G. M. Strain Energy Functions of Rubber. I. Characterization of Gum Vulcanizates. *Journal of Applied Polymer Science*, 19:2033–2058, 1975.
- James, H. M. und Guth, E. Theory of the elastic properties of rubber. *The Journal of Chemical Physics*, 11(10):455–481, 1943.
- Jensen, H. A. A Global Sensitivity Analysis in Structural Mechanics. *Computers & Structures*, 56(6), 1995.
- Joint Committee for Guides in Metrology (JCGM). Evaluation of measurement data - Supplement 1 to the “Guide to the expression of uncertainty in measurement” - Propagation of distributions using a Monte Carlo method. *Evaluation*, JCGM 101:2(September):90, 2008.
- Kirchner, E. und Simeon, B. A higher-order time integration method for viscoplasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 175:1–18, 1999.
- Kleiber, M., Antunez, H., Hien, T. D., und Kowalczyk, P. *Parameter sensitivity in non-linear mechanics*. John Wiley & Sons, Chichester, 1997.

- Kleijnen, J. P. An overview of the design and analysis of simulation experiments for sensitivity analysis. *European Journal of Operational Research*, 164(2):287–300, 2005.
- Knuth, K. Optimal data-based binning for histograms. *arXiv preprint physics/0605197*, 2006.
- Kohn, W. *Statistik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1 Auflage, 2005.
- Krämer, S., Rothe, S., und Hartmann, S. Homogeneous stress–strain states computed by 3D-stress algorithms of FE-codes: application to material parameter identification. *Engineering with Computers*, 31(1):141–159, 2015.
- Kreißig, R., Benedix, U., und Görke, U. J. Statistical aspects of the identification of material parameters for elasto-plastic models. *Archive of Applied Mechanics*, 71:123–134, 2001.
- Kreißig, R., Naumann, J., Benedix, U., Bormann, P., Grewolls, G., und Kretzschmar, S. Parameter Identification of Inelastic Deformation Laws analysing inhomogenous stress-strain states. Technischer bericht, TU Braunschweig, Braunschweig, 1996.
- Kretzschmar, S. *Parameteridentifikation elastisch-plastischer Deformationsgesetze durch Anpassung numerischer an experimentell ermittelte Verschiebungsfelder*. Dissertation, Technische Universität Chemnitz, 1998.
- Lee, E. H. Elastic-Plastic Deformation at Finite Strains. *Journal of Applied Mechanics*, 36:1–6, 1969.
- Lehn, J. und Wegmann, H. *Einführung in die Statistik*. Vieweg+Teubner Verlag, Wiesbaden, 2000.
- Lemaitre, J. und Chaboche, J.-L. *Mechanics of solid materials*. Cambridge University Press, Cambridge, 1990.
- Levenberg, K. A Method for the Solution of Certain Problems in Least Squares. *Quart. Appl. Math.*, 2:164–168, 1944.
- Lu, S. C. H. und Pister, K. S. Decomposition of Deformation and Representation of the Free Energy Function for Isotropic Thermoelastic Solids. *International Journal of Solids and Structures*, 11(7–8):927–934, 1975.
- Lubliner, J. A Model of Rubber Viscoelasticity. *Mechanics Research Communications*, 12:93–99, 1985.
- Mahnken, R. Theoretische und numerische Aspekte zur Parameteridentifikation und Modellierung bei metallischen Werkstoffen. Technischer bericht, Institut für Baumechanik und Numerische Mechanik, Universität Hannover, 1998.

- Mahnken, R. Aspects on the finite-element implementation of the Gurson model including parameter identification. *International Journal of Plasticity*, 15:1111–1137, 1999.
- Mahnken, R. An inverse Finite-element algorithm for parameter identification of thermoelastic damage models. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, 48(7):1015–1036, 2000.
- Mahnken, R. und Kuhl, E. Parameter identification of gradient enhanced damage models with the finite element method. *European Journal of Mechanics - A/Solids*, 18(5):819–835, 1999.
- Mahnken, R. und Stein, E. A unified approach for parameter identification of inelastic material models in the frame of the finite element method. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 136:225–258, 1996a.
- Mahnken, R. und Stein, E. Parameter identification for viscoplastic models based on analytical derivatives of a least-squares functional and stability investigations. *International Journal of Plasticity*, 12(4):451–479, 1996b.
- Mahnken, R. und Stein, E. Parameter identification for finite deformation elastoplasticity in principal directions. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 147:17–39, 1997.
- Marquardt, D. W. An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, 11(2):431–441, 1963.
- Matthies, H. G., Litvinenko, A., Pajonk, O., Rosić, B. V., und Zander, E. Parametric and Uncertainty Computations with Tensor Product Representations. In Dienstfrey, A. und Boisvert, R., Editor, *Uncertainty Quantification in Scientific Computing SE - 9*, Band 377 von *IFIP Advances in Information and Communication Technology*, Seiten 139–150. Springer Berlin Heidelberg, 2012.
- Mekid, S. und Vaja, D. Propagation of uncertainty: Expressions of second and third order uncertainty with third and fourth moments. *Measurement: Journal of the International Measurement Confederation*, 41(6):600–609, 2008.
- Mooney, M. Theory of Large Elastic Deformation. *Journal of Applied Physics*, 11:582–592, 1940.
- Naumann, U. *The Art of Differentiating Computer Programs: An Introduction to Algorithmic Differentiation*. SIAM Society for Industrial and Applied Mathematics, 2012.
- Netz, T. *High-order space and time discretization scheme applied to problems of finite thermo-viscoelasticity*. Dissertation, Technische Universität Clausthal, 2013.

- Netz, T., Düster, A., und Hartmann, S. High-order finite elements compared to low-order mixed element formulations. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 93:163–176, 2013.
- Newcombe, R. G. Two-sided confidence intervals for the single proportion: Comparison of seven methods. *Statistics in Medicine*, 17(8):857–872, 1998.
- Nocedal, J. A. und Wright, S. J. *Numerical optimization*. Springer series in operations research and financial engineering. Springer-Verlag New York, 1999.
- Nörenberg, N. und Mahnken, R. A stochastic model for parameter identification of adhesive materials. *Archive of Applied Mechanics*, 83(3):367–378, 2012.
- Ogden, R. W. *Non-linear Elastic Deformations*. Dover Civil and Mechanical Engineering Series. Dover Publications, 1997.
- Perzyna, P. Fundamental Problems in Viscoplasticity. *Advances in Applied Mechanics*, 9(C):243–377, 1966.
- Quint, K. *Thermomechanically coupled processes for functionally graded materials: Experiments, modelling, and finite element analysis using high-order dirk-*. Dissertation, Technische Universität Clausthal, 2012.
- Rabbat, N. B. G., Sangiovanni-Vincentelli, A. L., und Hsieh, H. Y. A multilevel newton algorithm with macromodeling and latency for the analysis of large-scale nonlinear circuits in the time domain. *IEEE Transactions on Circuits and Systems*, 26:733–740, 1979.
- Radanović, L., Editor. *Sensitivity Methods in Control Theory: Proceedings of an International Symposium Held at Dubrovnik, August 31–September 5, 1964*. Elsevier Science, 2014.
- Rentrop, P., Strehmel, K., und Weiner, R. *Numerik gewöhnlicher Differentialgleichungen*, Band 76. Teubner Verlag, Stuttgart, 1995.
- Rieger, A. *Zur Parameteridentifikation komplexer Materialmodelle auf der Basis realer und virtueller Testdaten*. Dissertation, Universität Stuttgart, 2005.
- Rivlin, R. S. und Saunders, D. W. Large Elastic Deformations of Isotropic Materials VII. Experiments on the Deformation of Rubber. *Philosophical Transaction of the Royal Society of London*, Series A 2:251–288, 1951.
- Rosenbrock, H. H. Some general implicit processes for the numerical solution of differential equations. *Computer Journal*, 5:329–331, 1963.

- Rosić, B. V. *Variational Formulations and Functional Approximation Algorithms in Stochastic Plasticity of Materials*. Dissertation, University of Kragujevac, 2013.
- Rosić, B. V., Kučerová, A., Sýkora, J., Pajonk, O., Litvinenko, A., und Matthies, H. G. Parameter identification in a probabilistic setting. *Engineering Structures*, 50:179–196, 2013.
- Rosić, B. V. und Matthies, H. G. Computational approaches to inelastic media with uncertain parameters. *Journal of the Serbian Society for Computational Mechanics*, 2(1):28–43, 2008.
- Rosić, B. V. und Matthies, H. G. Identification of Properties of Stochastic Elastoplastic Systems. In Papadrakakis, M., Stefanou, G., und Papadopoulos, V., Editor, *Computational Methods in Stochastic Dynamics SE - 14*, Band 26 von *Computational Methods in Applied Sciences*, Seiten 237–253. Springer Netherlands, 2013.
- Rothe, S., Hamkar, A.-W., Quint, K. J., und Hartmann, S. Comparison of diagonal-implicit, linear-implicit and half-explicit Runge-Kutta methods in non-linear finite element analyses. *Archive of Applied Mechanics*, 82:1057–1074, 2012.
- Rothe, S. und Hartmann, S. Automatic Differentiation for Stress and Consistent Tangent Computation. *Archive of Applied Mechanics*, 2014.
- Ryu, Y., Haririan, M., Wu, C., und Arora, J. Structural design sensitivity analysis of nonlinear response. *Computers & Structures*, 21(1-2):245–255, 1985.
- Sachs, L. und Hedderich, J. *Angewandte Statistik*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin/Heidelberg, 2012.
- Saltelli, A. Making best use of model evaluations to compute sensitivity indices. *Computer Physics Communications*, 145(2):280–297, 2002.
- Saltelli, A. Global Sensitivity Analysis : An Introduction. In *4th International Conference on Sensitivity*, Seiten 27–43. 2004.
- Saltelli, A., Tarantola, S., Campolongo, F., und Ratto, M. *Sensitivity Analysis in Practice*. Wiley, Chichester, 2004.
- Scheday, G. *Theorie und Numerik der Parameteridentifikation von Materialmodellen der finiten Elastizität und Inelastizität auf der Grundlage optischer Feldmessmethoden*. Phd-thesis, report no. i-11 (2003), University of Stuttgart (Germany), Institute of Mechanics, 2003.
- Schiesser, W. E. *The Numerical Method of Lines: Integration of Partial Differential Equations*. Academic Press, 1991.

- Schittkowski, K. *Numerical Data Fitting in Dynamical Systems: A Practical Introduction with Applications and Software*. Applied Optimization. Springer, 2002.
- Schwarz, H. R. und Köckler, N. *Numerische Mathematik*. Teubner, Stuttgart, 2004.
- Schwarz, H. R., Stiefel, E., und Rutishauser, H. *Matrizen-Numerik. Numerik symmetrischer Matrizen*. Teubner Verlag, Stuttgart, 2. Auflage, 1972.
- Scott, D. On optimal and data-based histograms. *Biometrika*, 1979.
- Sedlan, K. *Viskoelastisches Materialverhalten von Elastomerwerkstoffen: Experimentelle Untersuchung und Modellbildung*. Dissertation, Universität Gesamthochschule Kassel, 2000.
- Simo, J. C. und Taylor, R. L. Quasi-Incompressible Finite Elasticity in Principal Stretches. Continuum Basis and Numerical Algorithms. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 85:273–310, 1991.
- Simo, J. C., Taylor, R. L., und Pister, K. S. Variational and projection methods for the volume constraint in finite deformation elasto-plasticity. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 51:177–208, 1985.
- Spanos, P. D. und Zeldin, B. A. Monte Carlo Treatment of Random Fields: A Broad Perspective. *Applied Mechanics Reviews*, 51(3):219–237, 1998.
- Stefanou, G. The stochastic finite element method: Past, present and future. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 198(9-12):1031–1051, 2009.
- Sturges, H. The choice of a class interval. *Journal of the American Statistical Association*, 21(153):65–66, 1926.
- Sudret, B. Uncertainty propagation and sensitivity analysis in mechanical models—Contributions to structural reliability and stochastic spectral methods. . . . *diriger des recherches, Université Blaise Pascal*, . . . , 2007.
- Tadmor, E., Miller, R., und Elliott, R. *Continuum mechanics and thermodynamics: from fundamental concepts to governing equations*. Cambridge University Press, 2011.
- Tarantola, A. *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation*. SIAM, Philadelphia, 2005.
- Taylor, J. R. An Introduction to Error Analysis: The Study of Uncertainties in Physical Measurements. 1997.
- Treloar, L. R. G. The Elasticity of a Network of Long-Chain Molecules. I. *Rubber Chemistry and Technology*, 16(4):746–751, 1943.

- Truesdell, C. und Noll, W. *The non-linear field theories of mechanics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 3. Auflage, 2004.
- Tsay, J. und Arora, J. Nonlinear structural design sensitivity analysis for path dependent problems. Part 1: General theory. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 81(2):183–208, 1990.
- Weickum, G., Eldred, M., und Maute, K. Multi-point Extended Reduced Order Modeling For Design Optimization and Uncertainty Analysis. In *47th AIAA/ASME/ASCE/AHS/ASC Structures, Structural Dynamics, and Materials Conference, Structures, Structural Dynamics, and Materials and Co-located Conferences*. American Institute of Aeronautics and Astronautics, 2006.
- Wittekindt, J. *Die numerische Lösung von Anfangs-Randwertproblemen zur Beschreibung inelastischen Werkstoffverhaltens*. Dissertation, Institut für Mathematik, Universität Darmstadt, 1991.
- Wriggers, P. *Nonlinear finite element methods*. Springer Verlag, Berlin (etc.), 2008.
- Zhao, W., Seshadri, R., und Dubey, R. N. On Thick-Walled Cylinder Under Internal Pressure. *Journal of Pressure Vessel Technology*, 125(August):267, 2003.
- Zienkiewicz, O. C. und Taylor, R. *The finite element method for solid and structural mechanics*. Butterworth-Heinemann, Burlington, MA, 6 Auflage, 2005.

Liste der Publikationen

- [1] Krämer S., Rothe S., Hartmann S., Material parameter identification using model reduction to uniaxial tensile test, *Proceeding in Applied Mathematics and Mechanics*, 12(1):315–316, 2012
- [2] Krämer S., Rothe S., Hartmann S., Homogeneous stress–strain states computed by 3D-stress algorithms of FE-codes: application to material parameter identification, *Engineering with Computers*, 31(1):141–159, 2015

Curriculum Vitae

Persönliche Daten

Name	Stephan Krämer
Anschrift	Robert-Koch-Straße 34/2 73730 Esslingen am Neckar
Telefon	0176-80269553
E-Mail	kraemer.stephan@gmx.de
geboren am	21. September 1981 in Erfurt
Familienstand	ledig

Schulbildung

09. 1987 bis 06. 1991	Diesterweg-Grundschule Halle/Saale
09. 1991 bis 07. 2000	Adolph-Reichwein-Gymnasium Halle/Saale

Studium

10. 2001 bis 01. 2008	Studium der Physik an der Friedrich-Schiller-Universität Jena Diplomarbeit: <i>Multiplizität der Sterne in Corona Australis, Untersuchung einer neu entdeckten zirkumstellaren Scheibe</i>
-----------------------	---

Berufliche Tätigkeiten

04. 2008 bis 11. 2008	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für angewandte Physik der Friedrich-Schiller-Universität Jena
05. 2009 bis 12. 2014	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Technische Mechanik der Technischen Universität Clausthal
seit 04.2016	Software Developer bei Autoform Engineering GmbH, Esslingen am Neckar